

UNIVERSITE DU QUEBEC

MEMOIRE PRESENTE A

UNIVERSITE DU QUEBEC A TROIS-RIVIERES

COMME EXIGENCE PARTIELLE

DE LA MAITRISE ES SCIENCES (PHYSIQUE)

PAR

HELENE BOURQUE

ENERGIES DE TRANSITION

DU DIMERE DE LA CHLOROPHYLLE a

AOUT 1988

Université du Québec à Trois-Rivières

Service de la bibliothèque

Avertissement

L'auteur de ce mémoire ou de cette thèse a autorisé l'Université du Québec à Trois-Rivières à diffuser, à des fins non lucratives, une copie de son mémoire ou de sa thèse.

Cette diffusion n'entraîne pas une renonciation de la part de l'auteur à ses droits de propriété intellectuelle, incluant le droit d'auteur, sur ce mémoire ou cette thèse. Notamment, la reproduction ou la publication de la totalité ou d'une partie importante de ce mémoire ou de cette thèse requiert son autorisation.

## RESUME

La photoréception de l'énergie solaire est le processus primaire de la photosynthèse. Différents pigments, formant l'antenne, absorbent la lumière et la transfèrent sous forme d'exciton à un centre réactionnel. Parmi ces pigments, la molécule de chlorophylle a tient le rôle de photorécepteur primaire. Les expériences nous révèlent qu'elle existe sous plusieurs formes, absorbant à différentes longueurs d'onde selon son état d'agrégation.

Pour tenter d'élucider les différentes formes de la chlorophylle a et par conséquent son milieu naturel, divers modèles d'agrégats, tirés de la reproduction in vitro du spectre d'absorption in vivo de la chlorophylle a dans son environnement, ont vu le jour. Les oligomères de chlorophylle a,  $(\text{Chl}_2)_n$ , en est un exemple. Ce modèle, sans aucun fondement théorique, suppose les molécules situées perpendiculairement l'une par rapport à l'autre avec une interaction intermoléculaire faible qui est sans effet sur le déplacement spectral par rapport à la chlorophylle a monomère.

Or, un examen détaillé de ce modèle nous montre des failles dans

l'interprétation des résultats. Ceci nous a donc amené à effectuer une étude théorique sur ces oligomères. La première étape de cette étude consistait à déterminer l'orientation relative entre deux molécules de chlorophylle *a* dans le vide en minimisant l'énergie. Le présent travail, détermine le déplacement spectral résultant de ce dimère à partir d'un modèle simple, le modèle d'exciton. Un recouvrement intermoléculaire négligeable des fonctions d'onde, un emploi de l'approximation dipôle-dipôle et une utilisation des coefficients de la méthode *SCMO-PPP "quatre orbitales"* constituent la base de ce travail.

Cette présente étude démontre que le modèle d'exciton moléculaire est sensible à l'orientation relative des molécules de chlorophylle *a* composant le dimère. De plus, l'approximation dipôle-dipôle utilisée dans ce modèle excitonique décrit bien (en ordre de grandeur) l'état d'agrégation de la chlorophylle *a* sous forme de dimère. En effet, on trouve un déplacement spectral d'environ 116 nanomètres du dimère comparativement au monomère. Par conséquent, ces conclusions nous permettent d'envisager une étude sur le trimère avec le modèle d'exciton.

## REMERCIEMENTS

Ces deux dernières années ont été très bénéfiques dans le cheminement de mes études et je les dois à mes directeurs de recherche, Mrs Adel Antippa et Roger Leblanc. Ils m'ont aidé à acquérir une meilleure compréhension de la physique et à me familiariser avec les notions de chimie et de biologie. Le Docteur Leblanc m'a de plus donné un support financier indispensable. Je leurs suis reconnaissante de la confiance qu'ils m'ont témoignée tout au long de cette période et de leurs conseils lors de la rédaction de ce mémoire.

Je voudrais aussi remercier toutes les personnes qui ont, de près ou de loin, contribué à la réalisation de ce travail.

## TABLE DES MATIERES

RESUME .....	11
REMERCIEMENTS.....	iv
LISTE DES FIGURES.....	viii
LISTE DES TABLEAUX.....	ix
LISTE DES SYMBOLES.....	x
CHAPITRES	
I. INTRODUCTION	
A. Fonction de la photosynthèse .....	1
B. Chloroplaste .....	1
B.1. Structure du chloroplaste .....	1
B.2. Structure de la membrane du thylacoïde.....	3
B.3. Complexes photochimiques et complexes antennes ..	5
B.4. Complexes antennes primaires et secondaires .....	5
C. Relations entre les pigments et les protéines dans le	

complexe antenne. ....	7
D. Structure du complexe antenne et ses modèles. ....	8
E. Energies de transition du dimère de chlorophylle <u>a</u> (Chl) <sub>2</sub> ...	8
II. DIMERE DE CHLOROPHYLLE <u>a</u> (Chl) <sub>2</sub> : APPROXIMATION DIPOLE-DIPOLE	
A. Molécule de chlorophylle <u>a</u> ....	10
B. Solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires ....	13
C. Modèle théorique du complexe antenne: les oligomères de chlorophylle <u>a</u> ....	17
D. Dimère de chlorophylle <u>a</u> : Approximation dipôle-dipôle ....	23
III. MODELE D'EXCITON MOLECULAIRE	
A. Approche générale ....	31
B. Séparation en sous-systèmes ....	41
C. Modèle d'exciton moléculaire ....	45
D. Application du modèle d'exciton au dimère ....	57
I V. ENERGIES DE TRANSITION DU DIMERE DE CHLOROPHYLLE <u>a</u> : APPROXIMATION DIPOLE-DIPOLE	
A. Approche ....	73
B. Composantes du dimère : deux molécules de chlorophylle <u>a</u> .	77

C. Approximation dipôle-dipôle .....	83
D. Fonctions d'onde de la méthode SCMO-PPP .....	85
E. Système de coordonnées .....	93
F. Résultats .....	101
G. Discussion .....	110
V. CONCLUSION .....	116
ANNEXE	
A. METHODES THEORIQUES .....	118
B. ENERGIES D'INTERACTION VERSUS ANGLES D'EULER .....	129
BIBLIOGRAPHIE .....	166



## LISTE DES FIGURES

### Figure

1.	Chloroplaste .....	2
2.	Membrane du thylacoïde .....	4
3.	Structure de la molécule de chlorophylle <u>a</u> .....	11
4.	Spectre d'absorption des chlorophylles <u>a</u> et <u>b</u> monomères en solution dans l'éther éthylique .....	14
5.	Oligomères de chlorophylle a, (Chl <sub>2</sub> ) <sub>n</sub> .....	22
6.	Structure du 2-vinyle-6-carbonyl chlorure .....	25
7.	Dimère de chlorophylle <u>a</u> .....	27
8.	Schéma d'une séparation d'un niveau d'énergie dans le dimère. ....	81
9.	Longueurs de liaison et angles de liaison de la chlorophylle <u>a</u> ....	96

## LISTE DES TABLEAUX

### Tableau

1. Coefficients HOMO et LUMO de Weiss et les coordonnées atomiques de Kratky et Dunitz .....	94
2. Composantes des moments de transition dipolaire .....	104
3. Comparaison entre nos résultats et ceux de Shipman et al. ....	105
4. Comparaison des méthodes LCAO et FEMO dans leur application à la chlorophylle <u>a</u> .....	127

## LISTE DES SYMBOLES

$M_\alpha$	Masse du noyau $\alpha$
$Z_\alpha$	Numéro atomique du noyau $\alpha$
$N$	Nombre de noyaux dans le système
$N_i$	Nombre de noyaux dans le sous système $i$
$m_0$	masse de l'électron
$e$	Charge de l'électron
$M$	Nombre d'électrons dans le système
$M_i$	Nombre d'électrons dans le sous système $i$
$h$	Constante de Planck
$\epsilon_0$	Constante diélectrique dans le vide
$R_\alpha$	Coordonnées spatiales du noyau $\alpha$ d'un système
$r_a$	Coordonnées spatiales de l'électron $a$
$R_i$	Coordonnées spatiales des noyaux du sous système $i$
$R_{i\alpha}$	Coordonnées spatiales du noyau $\alpha$ du sous système $i$
$r_i$	Coordonnées spatiales des électrons du sous système $i$
$r_{ia}$	Coordonnées spatiales de l'électron $a$ du sous système $i$
$\hat{H}$	Opérateur hamiltonien du système

$\hat{H}_i$	Opérateur du sous système i
$\hat{V}$	Opérateur énergie potentielle du système
$\hat{U}_{ij}$	Opérateur d'énergie d'interaction entre les sous systèmes i et j
$\Phi^k$	Fonction d'onde à l'état k du système composé de sous systèmes
$\Phi_i^k$	Fonction d'onde du sous système i à l'état k
$\mathbf{H}$	Matrice des énergies propres du système composé de sous systèmes
$\mathbf{H}$	Matrice des énergies de transition du système composé de sous systèmes
$\mathbf{M}_{+-}$	Moment de transition dipolaire du système composé de sous systèmes
$\mathbf{M}^{k0}_j$	Moment de transition dipolaire du sous système j de l'état fondamental à l'état excité k
$s$	Distance entre deux centres atomiques de la molécule 1 et 2
$\hat{n}$	Vecteur unitaire le long de $\mathbf{s}$
$\chi_{ij}$	Orbitale moléculaire du $j^{\text{ème}}$ électron de la molécule i
$\mathbf{P}$	Opérateur de permutation
$\xi^i_\lambda$	Orbitale atomique de la molécule i centrée autour du $\lambda^{\text{ème}}$ atome
$D^{(i)}_{\eta J}$	Coefficient "orbitale moléculaire J" de la $\eta^{\text{ème}}$ orbitale atomique centrée autour du $\eta^{\text{ème}}$ atome de la molécule i

## CHAPITRE I

### INTRODUCTION

#### A- Fonction de la photosynthèse

Le métabolisme des plantes vertes est régi par un mécanisme fort complexe, qui se situe dans le chloroplaste, siège de la photosynthèse. Sous l'influence de l'énergie solaire, les plantes produisent, à partir de gaz carbonique et d'eau, les hydrates de carbone nécessaires à leur développement. De plus, lors du processus photosynthétique, il s'effectue une libération d'oxygène, élément vital pour l'être humain.

#### B- Chloroplaste

##### B.1. Structure du chloroplaste

Le chloroplaste [1], dans lequel se localise l'appareil photosynthétique, possède habituellement une forme globulaire ou discoïde. Sa taille varie dans un intervalle de un à dix micromètres de diamètre. Sa structure, telle que présentée à la figure 1, se compose d'une double membrane (interne et externe) qui maintient en contact une phase liquide, le stroma, avec un réseau membranaire formé de thylacoïdes. La disposition des thylacoïdes dans le réseau membranaire se présente sous

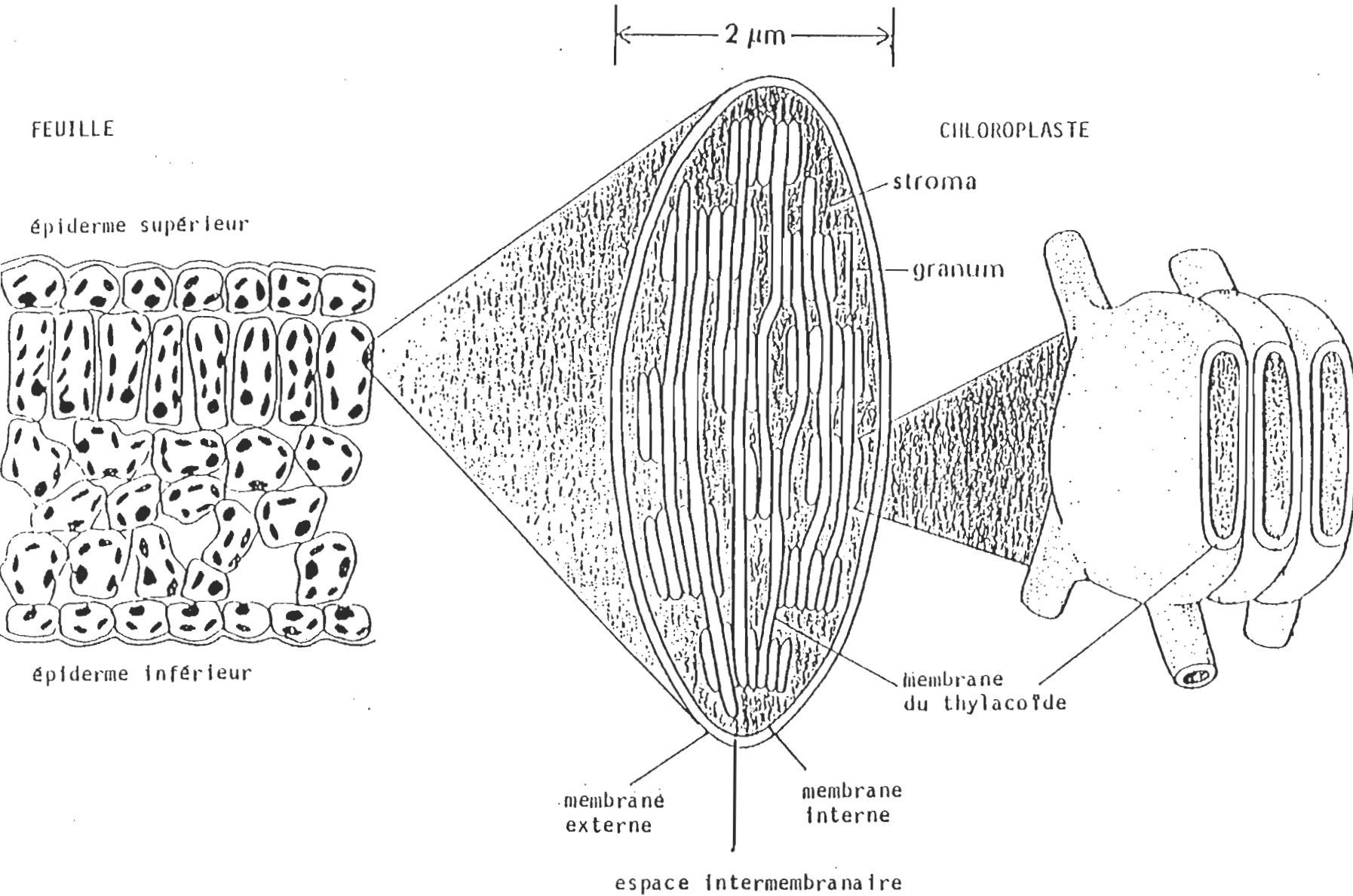


Figure 1. Chloroplaste [1].

un arrangement extrêmement ordonné. On observe l'empilement des plus petits thylacoïdes les uns sur les autres pour former une structure organisée, le granum. Chaque granum se connecte à un autre via un thylacoïde de grande dimension qu'on désigne par lamelle intergranulaire ou thylacoïde stromatique. L'ensemble, i.e. les thylacoïdes granaires et les thylacoïdes stromatiques, donne ainsi une représentation structurale lamellaire au chloroplaste. Une vue tridimensionnelle du thylacoïde le montre comme une membrane se refermant sur elle-même sous forme de sac clos et aplati dénommé vésicule.

## B.2. Structure de la membrane du thylacoïde

Dans la membrane du thylacoïde [2,3] se concentrent tous les pigments de la photosynthèse, les lipides polaires et près de la moitié des protéines du chloroplaste. Parmi les pigments, on retrouve entre autres la chlorophylle a, la chlorophylle b et les caroténoïdes. Ces composantes du thylacoïde s'organisent de telle manière que la structure de la membrane, telle qu'illustrée à la figure 2, prend l'aspect d'une bicouche lipidique d'une épaisseur d'environ 100 Å dans laquelle les pigments et les protéines existent sous forme de complexes de pigment-protéine (CPP). On identifie deux types de complexes thylacoïdaux soient le photosystème I (PSI) et le

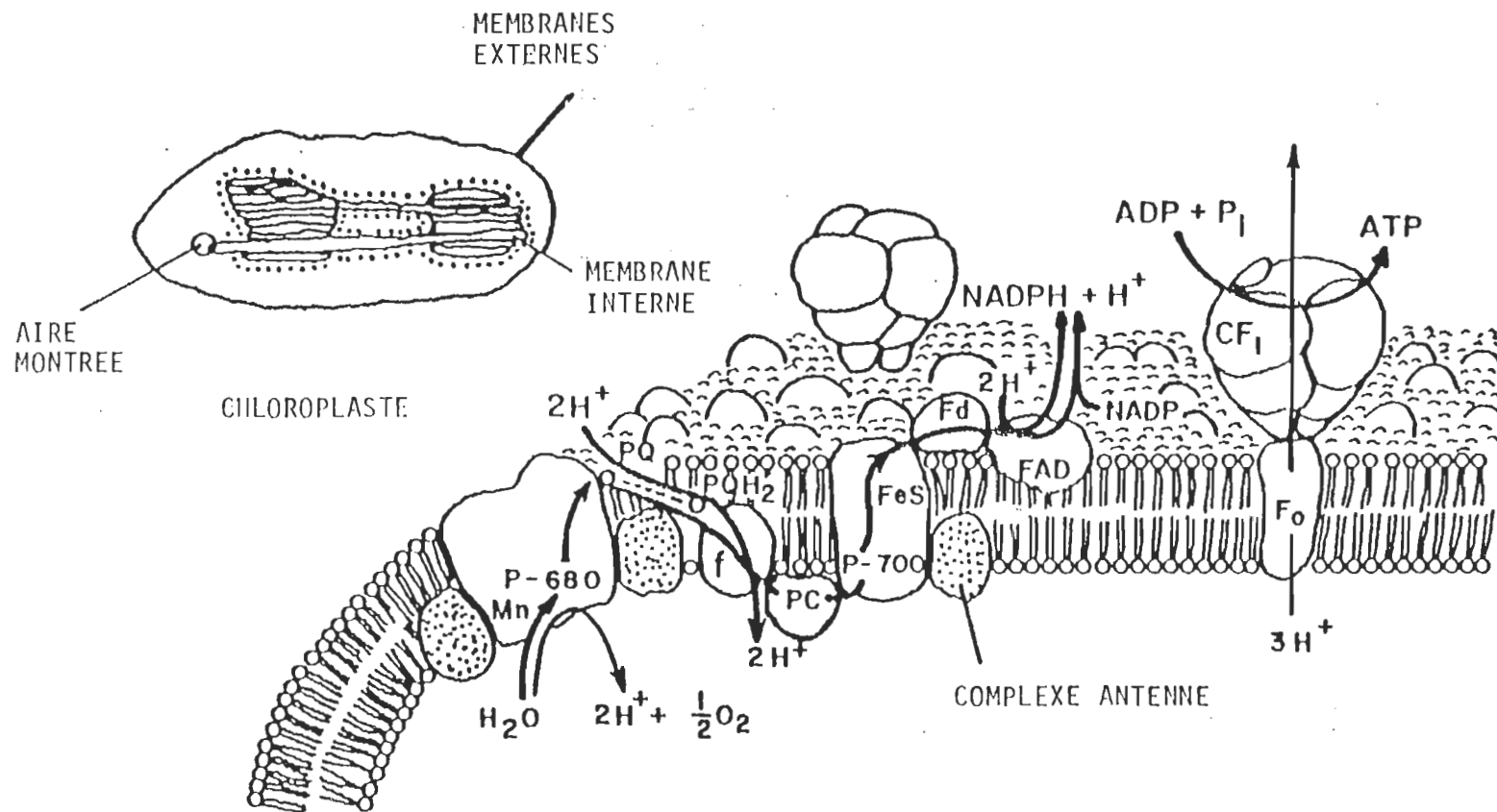


Figure 2. Membrane du thylacoïde [4].



photosystème II (PSII) [4]. Ces complexes confèrent au thylacoïde la responsabilité de capter l'énergie lumineuse et de la convertir en énergie chimique nécessaire à la réduction du gaz carbonique.

### B.3. Complexes photochimiques et complexes antennes

Fonctionnellement, chaque complexe PSI ou PSII se sépare en deux unités [4]: un complexe photochimique et un complexe antenne (ou complexe régulateur). Le complexe photochimique se définit comme un centre réactionnel photochimique qui piège l'énergie lumineuse, produit une séparation de charges entre un donneur et un accepteur primaire d'électron, puis transfère cet électron à un intermédiaire. L'objectif de ce transfert est de fournir un gradient de potentiel chimique élevé à la membrane photosynthétique. On distingue deux centres réactionnels photochimiques, le P700 et le P680, associés respectivement au PSI et au PSII. Quant au complexe antenne, il a pour fonction de capter l'énergie électromagnétique, ce qui permet la formation d'excitons, et de les stabiliser jusqu'à leur transfert au centre réactionnel photochimique.

### B.4. Complexes antennes primaires et secondaires

Dans le complexe antenne, on retrouve deux composantes: le complexe antenne primaire ("core antenna complex") et le complexe antenne

secondaire ("light-harvesting complex"). Le complexe antenne primaire se localise à proximité du complexe photochimique. Cette association physique entre ces derniers complexes procure un excellent rendement dans le transfert excitonique. Ainsi, une fois l'énergie lumineuse absorbée dans le complexe antenne primaire, elle se propage très efficacement au centre photochimique associé. Les complexes antennes primaires du PSI et du PSII comptent en grande majorité des molécules de chlorophylle a (45% de toutes les molécules de chlorophylle a du thylacoïde [5]), ce qui fait de cette molécule le photorécepteur primaire de ces complexes.

Le complexe secondaire ("light-harvesting complex"), contrairement au complexe antenne primaire, s'associe moins fortement avec son complexe photochimique tant au point de vue énergétique que physique [4]. L'énergie lumineuse captée par celui-ci se transfère au centre réactionnel avec un rendement moins élevé. Cette inefficacité varie d'un photosystème à l'autre. En effet, le complexe secondaire du PS I fournit un rendement nettement inférieur dans le transfert de l'énergie électromagnétique vers le centre photochimique P700. Les composantes les plus importantes dans les complexes secondaires sont la chlorophylle a et la chlorophylle b, représentant approximativement 55% [5] de la chlorophylle totale (a et b)

du chloroplaste.

### C. Relations entre les pigments et les protéines dans le complexe antenne

Nos connaissances actuelles sur le complexe antenne nous empêchent de préciser la nature de l'interaction entre les molécules du pigment et les protéines. Nous savons à partir d'observations que les molécules pigmentaires sont organisées dans un environnement particulier qui rend un complexe PSI ou PSII capable de fournir un rendement optimum de conversion énergétique à l'intérieur de la membrane photosynthétique. Par exemple, cet effet de l'environnement sur les propriétés optiques de la chlorophylle a se manifeste grandement lorsque nous comparons ces propriétés in vivo et celles en solution polaire. De plus, il est connu que les molécules de chlorophylle existent sous différentes formes d'agrégation, chacune ayant un spectre d'absorption distinct. Nous ignorons toutefois si cet arrangement des molécules du pigment est généré par une interaction spécifique entre le pigment et la protéine et/ou par une interaction intrinsèque entre des molécules de l'agrégat. Pour tenter d'élucider ce dernier point, il existe un point de repère facilitant l'approche qui consiste à reproduire le spectre d'absorption de l'antenne in vitro.

#### D. Structure du complexe antenne et ses modèles

A ce jour, on compte plusieurs modèles de la membrane biologique. Chaque modèle repose sur un seul critère, la reproduction du spectre d'absorption de l'antenne *in vivo*. Par exemple, les solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires [6] et les films de chlorophylle [7,8] , caractérisés par la présence de chlorophylles seulement, reproduisent ce spectre. On déduit de ces différents modèles que les pigments (autres que les chlorophylles) tiennent une place secondaire dans l'absorption de l'énergie lumineuse. Certains modèles prédisent une interaction entre les molécules du pigment et la protéine dans le complexe antenne tandis que d'autres soutiennent l'absence d'interaction. Dans ce dernier cas, le rôle des protéines consisterait principalement à fournir un support aux molécules de chlorophylle et aux autres pigments dans le complexe antenne.

#### E. Energies de transition du dimère de chlorophylle a (Chl)<sub>2</sub>

Les références précédentes démontrent clairement l'importance de la molécule de chlorophylle a sous forme agrégée dans le complexe antenne. Toutefois, la reproduction du spectre théorique de ce complexe à partir d'un modèle d'agrégat de chlorophylle a déduit d'une expérience demeure un

échec. Etant donné le rôle primordial du complexe antenne dans la photosynthèse, il semble donc important d'attaquer le problème à la base avec un nouveau modèle théorique fondé sur des preuves expérimentales.

Ce travail s'effectuera sur le modèle des solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires où la chlorophylle a existe sous forme d'oligomères déshydratés,  $(\text{Chl})_n$ , dans le complexe antenne. Dans le cadre d'une étude théorique sur ces oligomères, nous nous proposons de calculer les énergies de transition de la plus petite unité, le dimère de chlorophylle a, en se basant sur un traitement théorique rigoureux qui donne l'orientation relative entre les molécules [9, 10]. Ainsi, il sera possible de poursuivre les investigations sur la validité de la structure proposée originellement avec ce modèle d'agrégat proposé à partir des solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires. Dans le prochain chapitre, nous exposerons brièvement le modèle théorique déduit des solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires ainsi que le modèle proposé de cette présente étude.

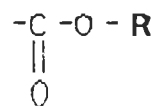
## CHAPITRE II

### DIMERE DE CHLOROPHYLLE a (Chl)<sub>2</sub>

#### APPROXIMATION DIPOLE-DIPOLE

##### A. Molécule de chlorophylle a

La molécule de chlorophylle a (figure 3) se classe parmi les macromolécules. Elle comprend deux parties principales: la partie hydrophile, le macrocycle, et la partie hydrophobe, la chaîne aliphatique. Dans le macrocycle, on identifie les quatre anneaux pyrroliques, notés I, II, III et IV, centrés sur un atome de magnésium, typiques de la famille des porphyrines. L'atome central de magnésium se situe au-dessus du plan du macrocycle. Attachés à ces anneaux, on retrouve un groupement vinyle ( $-\text{CH}=\text{CH}_2$ ), un groupement éthyle ( $-\text{CH}_2-\text{CH}_3$ ) et les groupements méthyles ( $-\text{CH}_3$ ). Un cinquième anneau, unique à la famille des chlorophylles, complète le macrocycle. Sur cet anneau se situe un groupement cétonique ( $\text{C}=\text{O}$ ) et un groupement ester



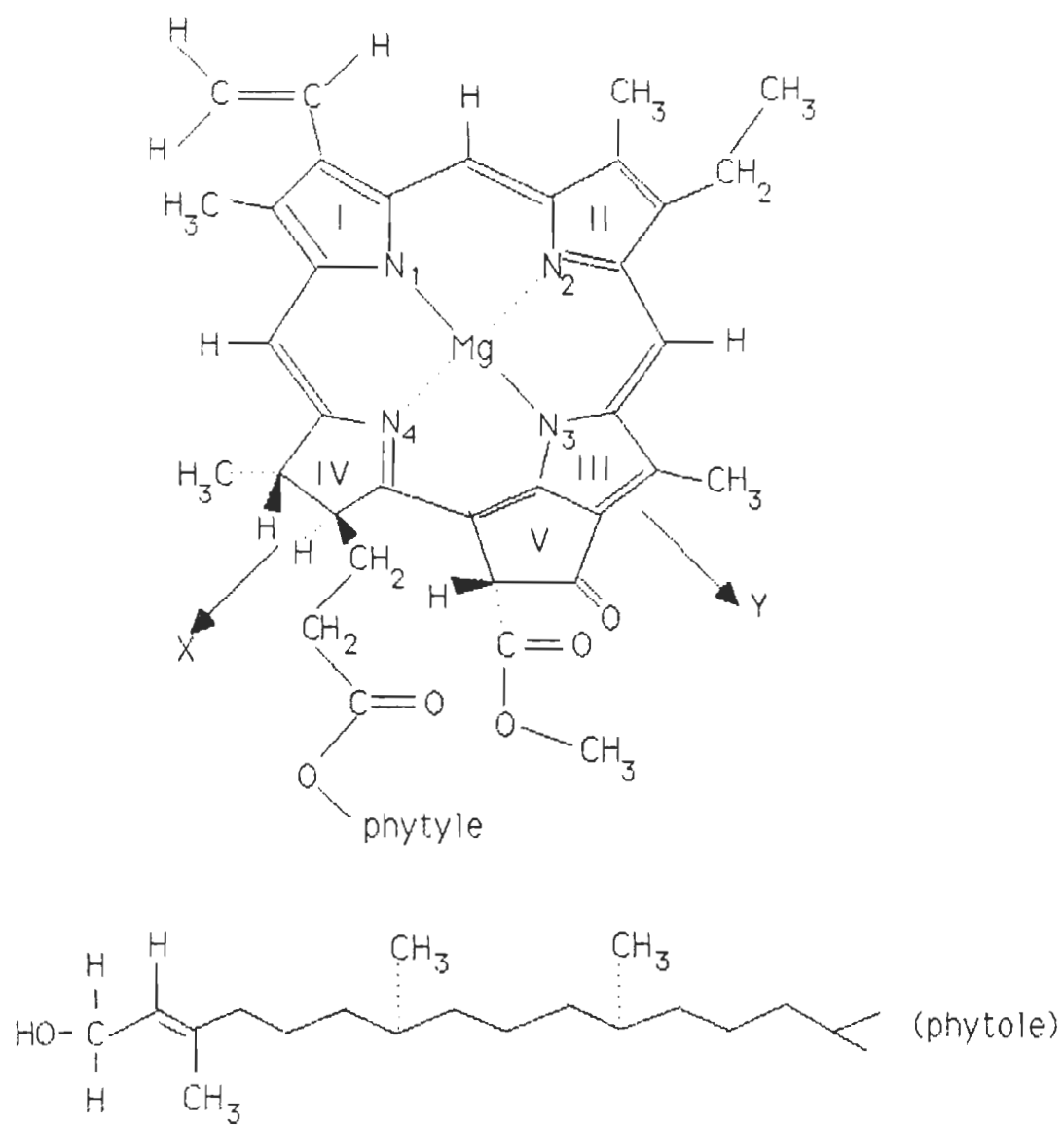
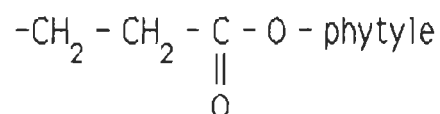


Figure 3. Structure de la molécule de chlorophylle *a*

où **R** représente le groupement  $-\text{CH}_3$ . La seconde partie principale de la chlorophylle a, la chaîne aliphatique,



se rattache au macrocycle par l'anneau IV. On reconnaît un autre groupement ester dans cette chaîne.

La molécule de chlorophylle a possède les propriétés de donneur et d'accepteur d'électron. Parmi l'ensemble des groupements identifiés sur la molécule, certains se définissent comme des groupements fonctionnels d'oxygène (donneurs d'électron). L'anneau V comprend un groupement cétonique  $\text{C}=\text{O}$  et un groupement ester et, la chaîne aliphatique inclut un autre groupement ester. Pour sa part, l'atome central de magnésium établit le rôle d'accepteur de la molécule de chlorophylle a. A partir des expériences, on déduit que les positions de coordination ou sites de liaison électrostatiques de l'atome de magnésium sont non saturés permettant à la molécule d'agir comme accepteur en présence d'un donneur d'électron. Elle se lie alors à une ou deux molécules, dans lequel cas, on lui associe un nombre de coordination de 5 ( $\text{Chl} \cdot \text{L}_1$ ) ou de 6 ( $\text{Chl} \cdot \text{L}_2$ ) respectivement. Une



nette préférence pour la liaison  $\text{Chl} \cdot \text{L}_1$  semble indiquer que l'atome de magnésium se situe au-dessus du cycle conjugué.

Le spectre d'absorption de la chlorophylle a monomère en solution se manifeste dans certains solvants polaires tels que l'acétone, la pyridine ou l'éther. Dans ce cas, seule sa propriété d'accepteur est mise en relief. Par exemple, lorsqu'on dissout une solution à faible concentration de chlorophylle a dans l'éther, son spectre d'absorption (figure 4) se caractérise par deux bandes principales, la bande de Soret  $B_x$  (ou bande bleue) et la bande rouge  $Q_y$ , dont les maxima se situent respectivement à des longueurs d'onde de 428.5 et 660.5 nanomètres. On observe aussi deux bandes secondaires,  $Q_x$  et  $B_y$ , avec des maxima près de 410 et 618 nanomètres [11]. Toutes ces bandes sont attribuées aux plus basses énergies de transition. Pour les autres solvants polaires mentionnés ci-dessus, on retrouve les mêmes caractéristiques spectrales mais à des longueurs d'onde légèrement différentes. La notation utilisée pour identifier ces bandes (Q et B) provient des caractéristiques de symétrie de la molécule [12].

#### B. Solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires

A partir de la connaissance des propriétés de donneur et d'accepteur

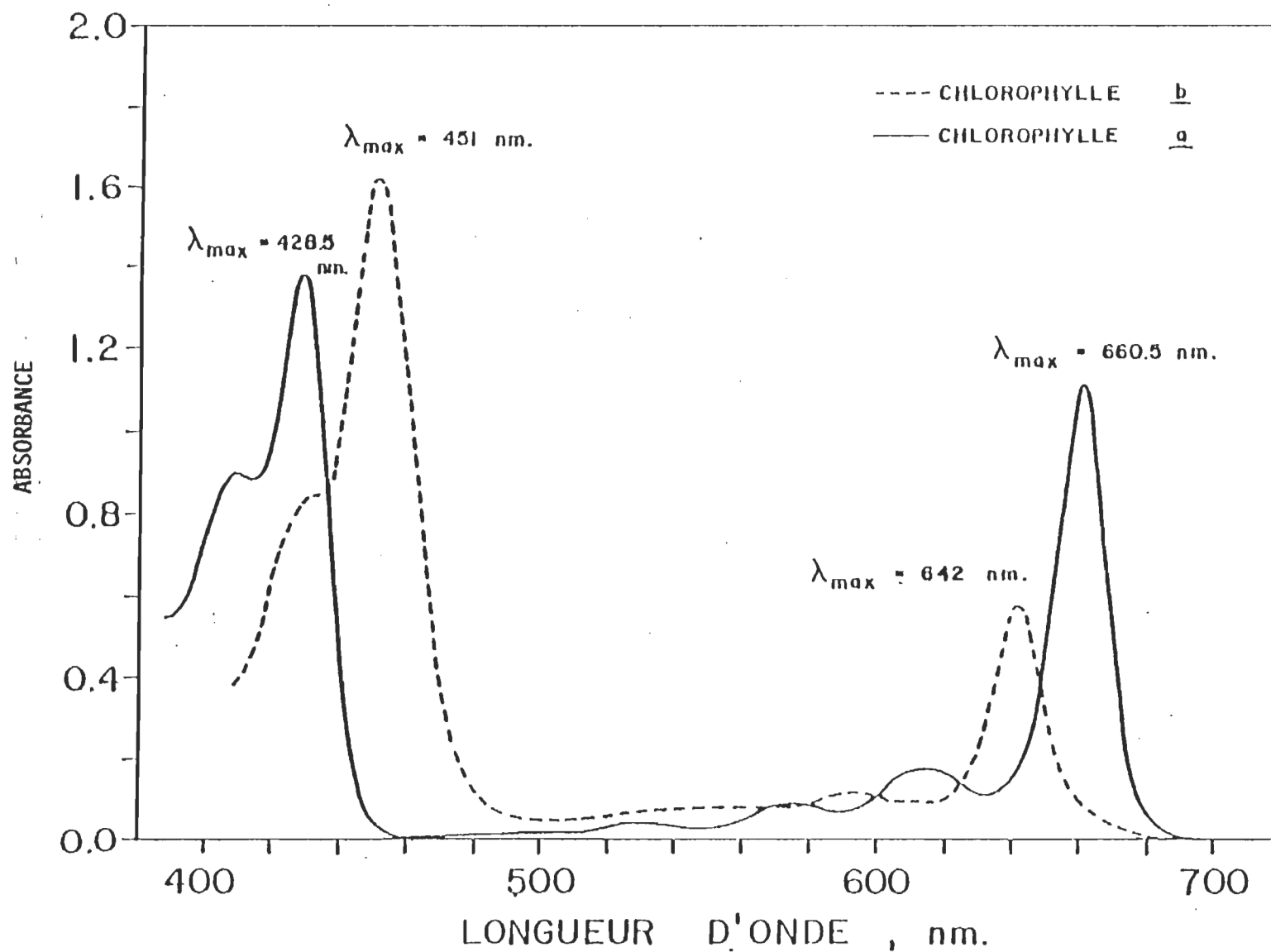


Figure 4. Spectre d'absorption des chlorophylles a et b monomères en solution dans l'éther éthylique [11].

de la molécule de chlorophylle a et de son état d'agrégation dans le complexe antenne, Katz et al. [6] effectuent des expériences pour reproduire les conditions in vivo de la membrane photosynthétique. Dans ces expériences, on utilise deux types de solvants non polaires: les solvants non polaires mais polarisables tels que le tétrachlorure de carbone et le benzène et les solvants non polaires et non polarisables, les hydrocarbures aliphatiques (hexane, dodécane, octane, etc.). En présence de la chlorophylle a, ces solvants non polaires repoussent le macrocycle chlorophyllien (répulsion électronique) de telle sorte que le magnésium d'une des molécules de chlorophylle a peut interagir directement ou indirectement (via l'eau) avec un des groupements donneurs d'une autre molécule.

La bande rouge du spectre d'absorption de la chlorophylle a pour ces deux types de solvants non polaires possède les caractéristiques suivantes. Dans le tétrachlorure de carbone et le benzène, la longueur d'onde maximale se situe approximativement à 678 nanomètres. La bande subit une déformation par rapport à la bande rouge de la chlorophylle a dans un solvant polaire. On constate aussi que dans un domaine de concentration de chlorophylle a de  $10^{-6}$  à  $10^{-2}$  mol  $l^{-1}$ , la bande ne change pas. Dans les

hydrocarbures aliphatiques, la longueur d'onde maximale est à 680 nanomètres. On observe aussi une déformation de la bande par rapport à la bande rouge de la chlorophylle a dans un solvant polaire mais dont la forme et l'intensité dépendent de la concentration de chlorophylle.

On effectue aussi des mesures du poids moléculaire des agrégats formés dans ces solvants non polaires par la technique d'osmométrie [6]. Pour le tétrachlorure de carbone ou le benzène, on obtient un poids moléculaire pour tous les agrégats correspondant au dimère de chlorophylle a qui ne dépend pas de la concentration de chlorophylle. Dans le cas des hydrocarbures aliphatiques, les poids moléculaires des agrégats présents sont reliés de la concentration de chlorophylle a. A faible concentration, on obtient le poids moléculaire du dimère de chlorophylle a seulement. A forte concentration, les poids moléculaires correspondent à des agrégats composés de 2 à 10 molécules (oligomères).

À partir des observations ci-dessus, on peut déduire un modèle de l'antenne. On sait que l'antenne in vivo absorbe à une longueur d'onde maximale de 680 nanomètres. En comparant cette longueur d'onde avec celles obtenues pour les bandes rouges dans les deux types de solvants non polaires ( $\approx 678$  et 680 nanomètres), on conclut que les solutions de

chlorophylle dans les solvants non polaires reproduisent les conditions in vivo de la membrane photosynthétique et par conséquent, simulent bien l'antenne.

### C. Modèle théorique du complexe antenne: les oligomères de chlorophylle a

Pour préciser la structure des agrégats ainsi que le type d'interaction intermoléculaire, on utilise la spectroscopie infrarouge, la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire, une étude théorique et la déconvolution de la bande rouge du spectre d'absorption visible [6,13, 14,15].

La spectroscopie infrarouge et de résonance magnétique nucléaire amènent à conclure qu'une des molécules de chlorophylle a joue le rôle d'accepteur via l'atome de magnésium alors qu'une autre joue le rôle de donneur via le groupement cétonique  $>C=O$  de l'anneau V. On décrit cette liaison par la notation  $Mg \cdots O=C<$ . Une étude théorique vient corroborer cette interprétation [16]. De plus, il ressort que la faible quantité d'eau présente dans les solutions ne peut servir d'intermédiaire entre la liaison des molécules de chlorophylle a. On estime aussi négligeable l'effet de la chaîne aliphatique sur cette liaison.

L'analyse des spectres déconvolués dans les deux types de solvants

non polaires se divise en quatre étapes: on déconvolue le spectre de la chlorophylle a dans le tétrachlorure de carbone (ou benzène), le spectre de la chlorophylle a dans les hydrocarbures aliphatiques, le spectre de la chlorophylle a accepteur monomère (interagit avec le solvant par son atome de magnésium) et le spectre de la chlorophylle a donneur monomère (interagit avec le solvant par un groupement ester). La déconvolution des spectres de la chlorophylle a accepteur et de la chlorophylle a donneur permet d'identifier les composantes des spectres de la chlorophylle a dans les solvants non polaires. Dans le tétrachlorure de carbone ou le benzène, on a deux composantes principales de déconvolution avec une même intensité et une aire identique. L'une possède une composante avec une longueur d'onde maximale d'environ 662 nanomètres tandis que l'autre possède une composante avec une longueur d'onde maximale d'environ 680 nanomètres. Pour les hydrocarbures aliphatiques, on retrouve à faible concentration les mêmes composantes que dans le tétrachlorure de carbone. Par contre, à forte concentration, nous avons une composante de forte intensité et de très grand aire avec une longueur d'onde maximale d'environ 680 nanomètres et une composante de faible intensité et de petite aire avec une longueur d'onde maximale d'environ 662 nanomètres. Pour la chlorophylle a accepteur monomère, on obtient une composante

principale de déconvolution avec une longueur d'onde maximale d'environ 662 nanomètres. La chlorophylle a donneur monomère se décrit par une composante principale de déconvolution avec une longueur d'onde maximale d'environ 678 nanomètres.

Si on examine les résultats ci-dessus, on remarque qu'une des composantes de déconvolution dans le tétrachlorure de carbone a une longueur d'onde maximale égale à la chlorophylle a accepteur et monomère tandis que l'autre possède une longueur d'onde maximale égale à la chlorophylle a donneur et monomère. Comme en plus, ces composantes dans le tétrachlorure de carbone ont la même intensité et la même aire alors, on en déduit qu'elles représentent la population relative des molécules accepteurs et donneurs (l'une par rapport à l'autre). Cette interprétation est en accord avec les mesures d'osmométrie dans ces solvants (tétrachlorure de carbone et benzène) puisque l'on retrouve autant de molécules accepteurs que de molécules donneurs dans les dimères. De plus, en comparant la longueur d'onde maximale de l'antenne *in vivo* (680 nm) avec celle de la composante de déconvolution associée à la molécule donneur ( $\approx 678$  nm), on affirme que le déplacement spectral de la bande rouge par rapport à celle de la chlorophylle a dans un solvant polaire tel qu'illustré à la figure 4 provient non pas de l'interaction  $\pi$ - $\pi$  (recouvrement

des orbitales moléculaires) entre les molécules mais reflète les deux populations de chlorophylle a dans des conditions différentes (donneur et accepteur). Par conséquent, on conclut que les molécules dans le dimère doivent s'orienter perpendiculairement l'une par rapport à l'autre (sans interaction  $\pi-\pi$ ) minimisant ainsi l'énergie d'interaction intermoléculaire. Enfin, on explique que la formation d'une unique unité, le dimère, s'attribue au fait que le solvant est polarisable et donc, solvate la molécule de chlorophylle a, limitant ainsi les interactions entre les molécules.

Pour l'autre type de solvants non polaires, les hydrocarbures aliphatiques, on constate qu'à faible concentration de chlorophylle a, on obtient les mêmes composantes de déconvolution que dans le tétrachlorure de carbone ou dans le benzène. On maintient alors la même interprétation, i.e., les composantes représentent la population relative des molécules accepteurs et donneurs. Notons que les mesures d'osmométrie corroborent cette conclusion puisque l'on obtenait seulement des poids moléculaires du dimère. À forte concentration de chlorophylle a, l'intensité des composantes de déconvolution se modifie par rapport à celles obtenues à faible concentration. La composante avec un  $\lambda_{\text{max}}$  d'environ 662 nanomètres diminuant fortement d'intensité, on en déduit que le nombre de



molécules jouant le rôle d'accepteur seulement, relativement au nombre de molécules jouant le rôle de donneur, est très petit. Ainsi, la composante de forte intensité représente la population relative des molécules accepteurs-donneurs et des molécules donneurs. Une fois de plus, cette interprétation est en accord avec les mesures d'osmométrie qui donnaient des poids moléculaires d'agrégats pouvant dépasser les 20 000 équivalent-grammes ( $> 10$  molécules). L'augmentation de la longueur des agrégats s'explique par le fait que les hydrocarbures aliphatiques étant des solvants non polarisables, ils tendent à exclure le macrocycle de la chlorophylle a permettant des interactions additionnelles. Finalement, le faible déplacement spectral entre le spectre d'absorption dans le tétrachlorure de carbone et les hydrocarbures aliphatiques amène à conclure que l'interaction intermoléculaire est négligeable. Alors, de même que pour le dimère, on interprète le déplacement spectral comme reflétant deux populations de chlorophylle a dans des conditions différentes: les molécules accepteurs seulement et les molécules donneurs avec les molécules accepteur-donneur. Par conséquent, on retrouve des dimères se reliant les uns avec les autres pour donner les oligomères  $(\text{Chl}_2)_n$ , où  $n$  se situe entre 2 et 10 (ou  $> 10$ ) tel qu'illustré par la figure 5. Ces oligomères représentent le modèle théorique du complexe antenne des solutions de

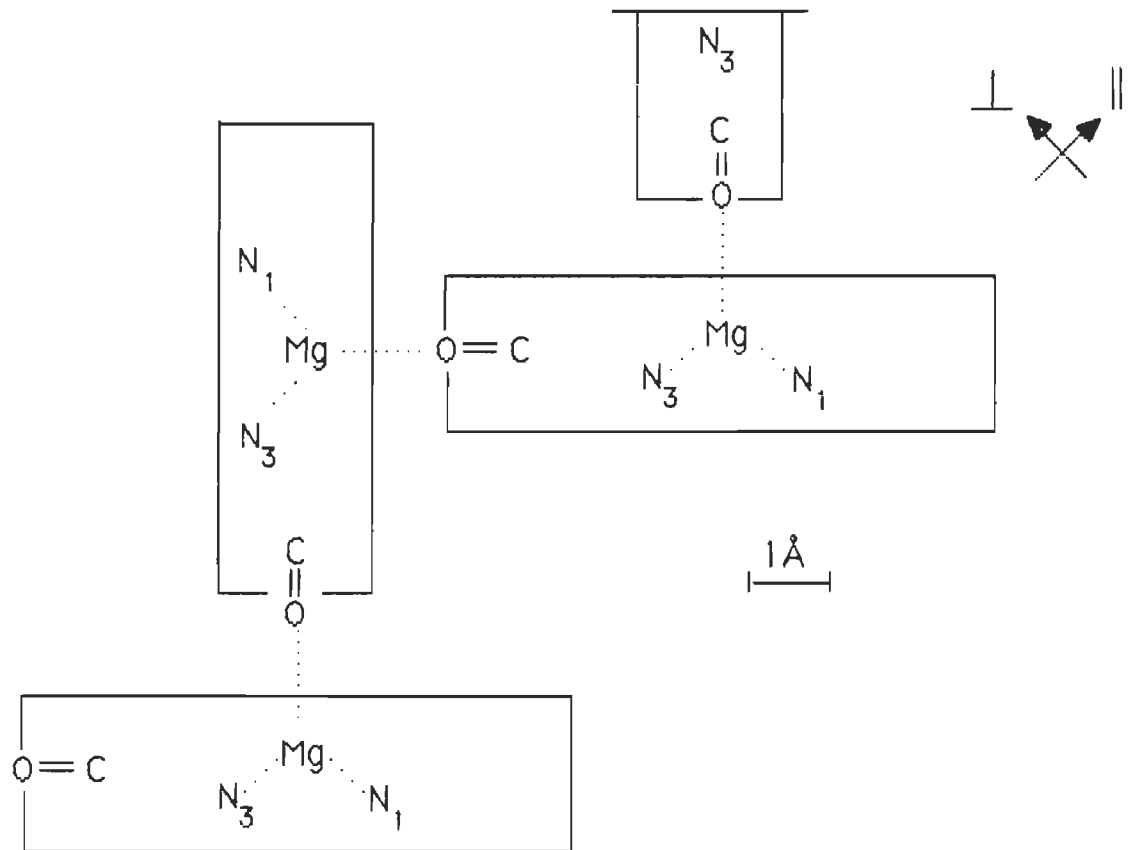


Figure 5. Oligomères de chlorophylle a,  $(\text{Chl}_2)_n$  [15]

chlorophylle a dans les solvants non polaires.

Dans ce modèle, on identifie plusieurs failles dans l'interprétation. D'abord, les mesures d'osmométrie sont imprécises pour de petits agrégats (dimères). Aussi, le déplacement spectral observé dans le tétrachlorure de carbone ou le benzène pourrait provenir de l'interaction entre le solvant et la chlorophylle a. Et enfin, la technique d'osmométrie donne une répartition des poids moléculaires dans les hydrocarbures aliphatiques basés sur les statistiques.

#### D. Dimère de chlorophylle a : Approximation dipôle-dipôle

Le modèle théorique précédent repose en grande partie, comme il a été mentionné, sur des interprétations litigieuses. La fragilité de ce modèle a incité un groupe de chercheurs à effectuer une étude théorique exhaustive sur les oligomères de chlorophylle a [9, 10, 17].

Une partie de notre étude consistait à déterminer l'orientation relative des molécules de chlorophylle a dans le dimère  $(Chl)_2$  en minimisant l'énergie d'interaction [9, 10]. Le modèle du dimère utilisé dans ce travail repose sur certaines approximations. Premièrement, on assume l'énergie de liaison due partiellement à l'interaction dipôle-dipôle

et partiellement au lien cétone  $C=O \cdots Mg$ . L'utilisation de l'approximation dipôle-dipôle implique un non recouvrement des distributions de charges entre les molécules et des charges centrées aux centres atomiques. Deuxièmement, la structure des molécules de chlorophylle a est assumée rigide lors de la minimisation de l'énergie d'interaction et non perturbée par l'interaction intermoléculaire. Cette approximation se justifie par le fait que l'interaction dipôle-dipôle est de l'ordre de -0.04 électron-volt alors que les énergies de liaison intra-atomiques de chaque molécule se situent entre -3 et -8 électron-volts. Troisièmement, on suppose l'effet négligeable de la chaîne aliphatique sur l'association ou sur les moments dipolaires ainsi que sur l'orientation relative. Finalement, on fait l'hypothèse que lors de l'excitation de la molécule, comme dans l'état fondamental, le solvant n'a aucun effet sur l'orientation relative du dimère dissout.

La structure de la molécule de chlorophylle a se décrit par les plans et par les coordonnées de tous les atomes par rapport aux plans donnés par Kratky et Dunitz [18]. Chaque atome de carbone (C), d'azote (N) et d'oxygène (O) contribue pour un électron et le magnésium pour 2 électrons dans la structure illustrée à la figure 6, ce qui totalise un nombre de 28 électrons.

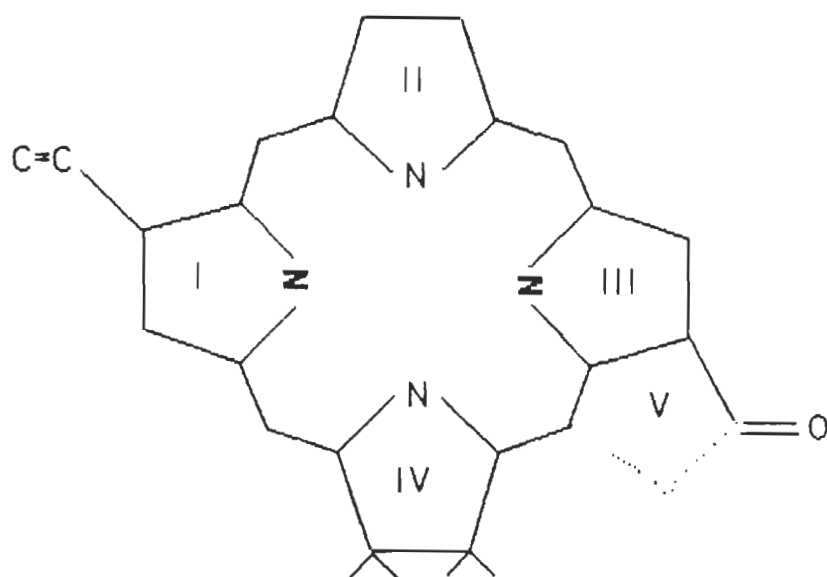


Figure 6. 2-vinyle-6-carbonyl chlorine [19]  
(Utilisée pour remplacer la structure de la chlorophylle a)

Pour le calcul des moments dipolaires des molécules, les densités électroniques sur chaque atome sont celles de Weiss [19]. Ces moments dipolaires  $\mathbf{p}$  de la chlorophylle  $\underline{a}$  s'évaluent par l'équation suivante

$$\mathbf{p} = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{r}_i \quad (2.1)$$

où N représente le nombre d'atomes impliqués,  $\mathbf{r}_i$  est la position atomique du noyau i et  $q_i$  la charge nette du noyau i.

Dans la figure 7, on présente la géométrie du dimère utilisée dans ce travail. Les caractéristiques géométriques essentielles et les paramètres se résument comme suit:

#### Plans

- Plan 1 coïncide avec le plan de  $(\text{Chla})_1$
- Plan 2 coïncide avec le plan de  $(\text{Chla})_2$
- Plan A est parallèle au plan 1 et passe par  $(\text{Mg})_1$
- Plan B est perpendiculaire au plan A, donc au plan 1, et coupe le plan 2 le long de la projection de la droite  $(\text{Mg})_1$  à  $(\text{Mg})_2$

Donc,  $(\text{Mg})_1$  se trouve simultanément sur les plans A, B et 2.



### Systèmes de coordonnées

$(x,y,z) \Rightarrow$  - origine sur  $(Mg)_1$

- Axes x-y dans le plan A, et l'axe z perpendiculaire au plan A

- Orientation de l'axe y coïncide avec la projection de la droite joignant  $(Mg)_1$  à  $(C=O)_1$  sur le plan A avec direction positive pointant vers la projection de  $(C=O)_1$

- L'axe des z est positif dans la direction du plan 1 au plan A

- L'axe x se détermine de telle sorte que  $(x,y,z)$  soit à angle droit

$(x',y',z') \Rightarrow$  - Origine sur  $(Mg)_1$

- L'axe x' est perpendiculaire au plan 2

- Les axes y' et z' sont dans le plan 2

- L'axe z' coïncide avec la projection de la droite joignant  $(Mg)_1$  à  $(Mg)_2$  sur le plan 2

- La direction de y' est de telle sorte que  $(x',y',z')$  soit à angle droit

$(x_1,y_1,z_1) \Rightarrow$  - parallèle à  $(x,y,z)$



- origine sur la projection de  $(Mg)_1$  sur le plan 1

$(x_2, y_2, z_2) \Rightarrow$  - parallèle à  $(x', y', z')$

- origine sur la projection de  $(Mg)_2$  sur le plan 2

### Angles d'Euler

-  $\alpha$ : de **y** à **k** (positifs dans le sens inverse des

$\beta$ : de **z** à **z'** aiguilles d'une montre)

-  $\gamma$ : de **k** à **y'** (négatif dans le sens des aiguilles  
d'une montre)

$s_1 \Rightarrow$  Le vecteur de l'origine de  $(x_1, y_1, z_1)$  à l'origine de  $(x, y, z)$

$s_2 \Rightarrow$  Le vecteur de l'origine de  $(x, y, z)$  à l'origine de  $(x_2, y_2, z_2)$

Les angles d'Euler  $\alpha, \beta$  et  $\gamma$  ont été déterminés en minimisant l'énergie d'interaction dipôle-dipôle  $U$  [9]

$$U = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{s^3} \left[ \mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2 - 3 (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_1) (\hat{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{p}_2) \right] \quad (2.2)$$

où  $\mathbf{p}_1$  et  $\mathbf{p}_2$  sont les moments dipolaires de  $(Chla)_1$  et  $(Chla)_2$  respectivement,  $\epsilon_0$  la constante diélectrique du vide,  $\mathbf{s}$  représente le

vecteur joignant les centres géométriques des deux molécules

$$\mathbf{s} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 \quad (2.3)$$

et  $\hat{\mathbf{n}}$  correspond au vecteur unitaire le long de  $\mathbf{s}$ ,

$$\hat{\mathbf{n}} = \frac{\mathbf{s}}{s}$$

Les minima de  $U(\alpha, \beta, \gamma)$  ont été évalués par un calcul numérique. Les résultats obtenus sont

$$\alpha = -88.24^\circ, \beta = 85.10^\circ, \gamma = 1.69^\circ$$

Et l'énergie d'interaction minimum correspondante possède une valeur de - 0.0444 électron-volt. Dans l'annexe 1, nous présentons les résultats des différentes méthodes qui ont été appliquées sur la chlorophylle a, afin de bien comprendre la signification de ces angles déduits à partir des densités électroniques de la méthode SCMO-PPP "Quatre orbitale".

A partir de ce modèle théorique, il nous est maintenant possible de poursuivre l'étude, c'est-à-dire la détermination du spectre d'absorption du dimère. Pour résoudre ce problème, nous utiliserons le modèle d'exciton moléculaire en accord avec les hypothèses du modèle du dimère. Dans le prochain chapitre, nous présentons le formalisme général.

## CHAPITRE III

### MODELE D'EXCITON MOLECULAIRE

#### A. Approche générale

On considère un système atomique où l'énergie potentielle totale  $V$  consiste en des interactions coulombiennes électrostatiques entre toutes les paires de charges, électrons et noyaux. Soit  $\mathbf{R}=(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_N)$  les coordonnées spatiales des  $N$  noyaux et soit  $\mathbf{r}=(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_M)$  les coordonnées spatiales des  $M$  électrons. Les indices grecs s'associent aux noyaux et les indices latins (lettre minuscule), aux électrons. On a

$$\mathbf{R}_\alpha=(X_\alpha, Y_\alpha, Z_\alpha), \quad \mathbf{r}_a=(x_a, y_a, z_a)$$

Alors l'hamiltonien du système total  $\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  s'écrit

$$\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 - \sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 + \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (3.1)$$

où  $\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ , l'énergie potentielle, est donnée par

$$\begin{aligned} \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = & \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{a,b=1}^M \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{a=1}^M \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}_\alpha|} \\ & + \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha,\beta=1}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|\mathbf{R}_\alpha - \mathbf{R}_\beta|} \quad (3.2) \end{aligned}$$

Chaque terme des équations (3.1) et (3.2) désigne

$$- \sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_\alpha} \nabla_\alpha^2 \quad (\text{terme cinétique nucléaire})$$

$$- \sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 \quad (\text{terme cinétique électronique})$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{a,b=1}^M \frac{1}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b|} \quad (\text{répulsion électronique})$$

$$- \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha=1}^N \sum_{a=1}^M \frac{Z_\alpha}{|\mathbf{r}_a - \mathbf{R}_\alpha|} \quad (\text{attraction électron-noyau})$$

$$+ \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\alpha, \beta=1}^N \frac{Z_\alpha Z_\beta}{|R_\alpha - R_\beta|} \quad (\text{répulsion nucléaire})$$

avec

$$\nabla_\alpha^2 = \frac{\partial^2}{\partial X_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Y_\alpha^2} + \frac{\partial^2}{\partial Z_\alpha^2} \quad (\text{Laplacien du noyau } \alpha)$$

$$\nabla_a^2 = \frac{\partial^2}{\partial x_a^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_a^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_a^2} \quad (\text{Laplacien de l'électron } a)$$

Le  $\alpha^{\text{ième}}$  noyau a une masse  $M_\alpha$  et un numéro atomique  $Z_\alpha$  et, l'électron a une masse  $m_0$ . On utilise la convention du prime sur la sommation pour indiquer l'exclusion des termes avec les mêmes indices.

L'indépendance temporelle explicite de notre hamiltonien (3.1) nous permet d'écrire la fonction d'onde générale, qui donne toutes les informations sur notre système, comme [20, 21]

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) p(t) \quad (3.3)$$

L'évolution de toute fonction d'onde d'un système quantique se détermine par l'équation de Schrödinger (Postulat)

$$\hat{H} \Psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (3.4)$$

En substituant la fonction d'onde (3.3) et l'hamiltonien (3.1) dans l'équation ci-dessus, on obtient deux équations aux dérivées partielles. La première représente l'équation de Schrödinger indépendante du temps

$$\left[ -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 - \sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla_a^2 + \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \right] \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (3.5)$$

où la constante  $E$  possède les dimensions de l'énergie. La seconde équation aux dérivées partielles nous donne la partie temporelle de la fonction d'onde

$$p(t) = e^{-(i/\hbar)Et} \quad (3.6)$$

On écrit la fonction d'onde de notre système comme

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = e^{-(i/\hbar)Et} \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \quad (3.7)$$

avec les conditions de normalisation suivantes

$$\int \phi^*(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d\mathbf{r} d\mathbf{R} = 1 \quad , \quad \rho^*(t) \rho(t) = 1$$

En solutionnant l'équation de Schrödinger indépendante du temps (3.5), on trouve les fonctions propres et les énergies propres de notre hamiltonien (3.1). On appelle les fonctions d'onde propres  $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  du système, les états propres d'énergie, parce que la densité de probabilité,  $|\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)|^2 = |\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})|^2$ , ne change pas avec le temps.

Pour résoudre l'équation (3.5) dans le cas d'un système complexe, il est utile de recourir à l'approximation de Born-Oppenheimer [22]. Cette approximation nous dit qu'en tenant compte de la grande différence de masse entre l'électron et le noyau, on peut remplacer la fonction exacte  $\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  par le produit des fonctions

$$\phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \equiv \Omega(\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \quad (3.8)$$

où  $\Omega(\mathbf{R})$  représente la fonction d'onde nucléaire et  $\Phi(\mathbf{r}; \mathbf{R})$  la fonction d'onde électronique avec noyaux fixes. On utilise le point virgule pour séparer les variables  $\mathbf{r}$  des paramètres  $\mathbf{R}$ . Alors en substituant dans l'équation de

Schrödinger (3.5) l'équation (3.8) on obtient

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \left[ -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \Omega(\mathbf{R}) \right] + \Omega(\mathbf{R}) \left[ -\sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \right] \\ + \hat{V}(\mathbf{r},\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \Omega(\mathbf{R}) = E \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \Omega(\mathbf{R}) \end{aligned} \quad (3.9)$$

On multiplie de chaque côté de l'équation ci-dessus par  $m_0$  alors on a

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \left[ -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2 m_0}{2 M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 \Omega(\mathbf{R}) \right] + m_0 \Omega(\mathbf{R}) \left[ -\sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \right] \\ + \hat{V}(\mathbf{r},\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \Omega(\mathbf{R}) m_0 = m_0 E \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \Omega(\mathbf{R}) \end{aligned}$$

Puisque  $m_0/M_{\alpha} \ll 1$ , alors le terme cinétique nucléaire est petit devant tous les autres termes. Donc nous pouvons résoudre l'équation ci-dessus séparément

$$\left[ -\sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \right] + \hat{V}(\mathbf{r};\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = \epsilon(\mathbf{R}) \Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) \quad (3.10a)$$



L'opérateur d'énergie potentielle  $\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  donné par l'équation (3.2) égal  $\hat{V}(\mathbf{r}; \mathbf{R})$  puisque les noyaux sont fixes et, l'énergie du système dépendra des positions de ces noyaux. Donc l'équation (3.10a) décrit le mouvement des électrons dans un potentiel créé par des attractions et des répulsions coulombiennes électrostatiques entre les particules, mais en maintenant les positions nucléaires fixes. Si on revient à l'équation (3.9) en y substituant l'équation (3.10a) avec  $\hat{V}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  alors nous obtenons une autre équation qui isole le mouvement des noyaux

$$\left[ -\sum_{\alpha=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_{\alpha}} \nabla_{\alpha}^2 + \epsilon(\mathbf{R}) \right] \Omega(\mathbf{R}) = E \Omega(\mathbf{R}) \quad (3.10b)$$

L'approximation de Born-Oppenheimer nous dit que l'énergie  $E$  de l'équation (3.9) est une bonne approximation pour les niveaux d'énergie de l'équation exacte (3.5) de Schrödinger. Ainsi, l'équation (3.5) de notre système se sépare en deux équations aux valeurs propres: une équation pour le mouvement des électrons et une autre pour le mouvement des noyaux donnant les niveaux d'énergie.

L'approximation de Born-Oppenheimer, pour des systèmes possédant

un très grand nombre d'électrons et de noyaux augmente considérablement la difficulté dans le calcul des états stationnaires et des énergies propres. Nous pouvons simplifier ce système en tenant compte du fait que, dans les très grosses molécules, les électrons internes (les plus près des noyaux) et les électrons sigma de chaque noyau maintiennent ceux-ci dans une position à peu près fixe. Ainsi, on néglige la contribution apportée par le mouvement des noyaux. Ce qui signifie que l'équation (3.9) donne une bonne approximation des énergies propres et des états stationnaires de l'équation exacte (3.5),

$$\left[ \sum_{a=1}^M \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla_a^2 + \hat{V}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \right] \Phi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = E \Phi(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \quad (3.11)$$

Donc, le modèle représentant notre système consiste à prendre les noyaux fixes et à étudier le mouvement des électrons dans le potentiel créé par des attractions et des répulsions coulombiennes électrostatiques entre toutes les particules.

La détermination des états stationnaires  $\Phi(\mathbf{r}; \mathbf{R})$  du système pour un grand nombre d'électrons en résolvant l'équation aux valeurs propres (3.11) se révèle inaccessible. Poser un état stationnaire de départ en espérant trouver des énergies propres adéquates est tout aussi irréaliste. Il faut

donc recourir à nouveau à une approximation. On considère le mouvement de chaque électron indépendant de tous les autres électrons [23]. Par conséquent, l'état stationnaire  $\Phi(\mathbf{r};\mathbf{R})$  s'écrit comme une combinaison de fonctions d'onde à un électron, les orbitales moléculaires

$$\Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = \chi_1(\mathbf{r}_1;\mathbf{R}_1) \chi_2(\mathbf{r}_2;\mathbf{R}_2) \chi_3(\mathbf{r}_3;\mathbf{R}_3) \dots \chi_M(\mathbf{r}_M;\mathbf{R}_M)$$

Toutefois, ces orbitales moléculaires sont incomplètes pour deux raisons; elles ne spécifient pas l'état du spin de l'électron et ne tiennent pas compte du fait que les électrons sont indiscernables. Nous devons ajouter le spin ( $\alpha$  ou  $\beta$ ) à chaque orbitale moléculaire et construire l'état stationnaire sous forme de déterminant. On exprime habituellement la fonction d'onde à l'état fondamental avec un seul déterminant pour un nombre d'électrons pair ou impair ajoutant ainsi une nouvelle approximation au système. La forme la plus générale dans ce cas consiste à assigner aux  $p$  électrons  $\alpha$  et aux  $q$  électrons  $\beta$  deux ensembles complètement indépendants d'orbitales moléculaires  $\chi_1^\alpha, \chi_2^\alpha, \dots, \chi_p^\alpha$  et  $\chi_1^\beta, \chi_2^\beta, \dots, \chi_q^\beta$  (forme non restreinte)

$$\Phi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = N \sum_{\mathbf{P}} (-1)^{\rho} \mathbf{P} [\chi_1^{\alpha}(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \alpha(1) \chi_1^{\beta}(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \beta(2) \chi_2^{\alpha}(\mathbf{r}_3; \mathbf{R}_3) \alpha(3) \dots \\ \chi_q^{\beta}(\mathbf{r}_{2q}; \mathbf{R}_{2q}) \beta(2q) \chi_{q+1}^{\alpha}(\mathbf{r}_{2q+1}; \mathbf{R}_{2q+1}) \alpha(2q+1) \chi_{q+2}^{\alpha}(\mathbf{r}_{2q+2}; \mathbf{R}_{2q+2}) \\ \alpha(2q+2) \dots \chi_{p+q}^{\alpha}(\mathbf{r}_{p+q}; \mathbf{R}_{p+q}) \alpha(p+q) ] \quad (3.12)$$

où  $\mathbf{P}$  est un opérateur de permutation de 1, 2, ..., p+q,  $(-1)^{\rho}$  correspond à +1 ou -1 pour des permutations paires ou impaires respectivement et N la constante de normalisation. Ainsi, cette forme de la fonction d'onde  $\Phi(\mathbf{r};\mathbf{R})$  permet aux électrons de se retrouver dans toute orbitale. Le recouvrement spatial entre les orbitales moléculaires  $\chi$  déterminera la probabilité qu'un électron quelconque se décrive par une ou plusieurs orbitales. Ce déterminant abaisse les niveaux d'énergie.

Dans le reste de la présentation, on travaillera dans le système d'unité atomique pour éviter l'encombrement des constantes physiques. Les unités de base se définissent comme suit,

unité de la masse= masse de l'électron  $m_0$

unité de la charge électrique= charge du proton  $e$

unité du moment angulaire=  $\hbar/2\pi$

unité de permittivité=  $4\pi\epsilon_0$

unité de longueur=  $4\pi\epsilon_0\hbar^2/m_0e^2$  (0,529177 Angströms)

unité d'énergie=  $m_0e^4/(4\pi\epsilon_0\hbar)^2$  (27,2166 électron-volts)

Les unités de longueur et d'énergie dérivent directement des précédentes.

#### B. Séparation en sous-systèmes

Le modèle du système dérivé précédemment (noyaux fixes dans l'approximation de Born-Oppenheimer) peut s'analyser d'une autre façon en présence de contraintes supplémentaires. Pour le cas qui nous intéresse, les agrégats moléculaires (dimère, trimère, etc), où les propriétés de chaque molécule constituant l'agrégat subissent des modifications internes assez faibles, on peut subdiviser le système en P sous-systèmes interagissant les uns avec les autres. Alors, l'hamiltonien total du système se décompose en deux parties: une partie représente l'ensemble des hamiltoniens de tous les sous-systèmes indépendants, tandis que l'autre partie tient compte de l'interaction entre ces sous-systèmes. Notons que la condition d'une faible interaction implique une convergence rapide dans les corrections à calculer dans les approximations apportées

aux fonctions d'onde et aux énergies du système total données en termes des fonctions d'onde et des énergies des sous-systèmes indépendants.

Comme dans la partie précédente, on recourt à l'approximation des noyaux fixes dans l'approximation de Born-Oppenheimer puisque l'on considère les propriétés de chaque sous-système légèrement altérées par les autres sous-systèmes. L'hamiltonien pour chaque sous-système n'inclut pas le Laplacien des noyaux. Dans le système total, on étudie le mouvement des électrons dans un potentiel créé par des attractions et des répulsions coulombiennes électrostatiques entre les noyaux et les électrons à l'intérieur de chaque sous-système et entre les sous-systèmes.

Dans le reste du travail, nous utilisons la convention suivante. Les lettres a, b, c et d désignent les électrons tandis que les lettres i, j, k,...,z désignent les sous-systèmes. Alors l'hamiltonien du sous-système i indépendant s'écrit de la façon suivante,

$$\begin{aligned} \hat{H}_i(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) = & -\frac{1}{2} \sum_{a=1}^{M_i} \nabla_{ia}^2 + \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{M_i} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ia} - \mathbf{r}_{ib}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_i} \sum_{a=1}^{M_i} \frac{Z_{i\alpha}}{|\mathbf{r}_{ia} - \mathbf{R}_{i\alpha}|} \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N_i} \frac{Z_{i\alpha} Z_{i\beta}}{|\mathbf{R}_{i\alpha} - \mathbf{R}_{i\beta}|} \end{aligned} \quad (3.13)$$

L'équation aux valeurs propres du sous-système  $i$  indépendant s'écrit

$$\hat{H}_i(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) = E_i \Phi_i(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \quad (3.14)$$

avec

$$\mathbf{r}_i = (r_{i1}, r_{i2}, r_{i3}, \dots, r_{iM_i}) \quad \mathbf{R}_i = (R_{i1}, R_{i2}, R_{i3}, \dots, R_{iN_i})$$

$$\mathbf{r}_{ia} = (x_{ia}, y_{ia}, z_{ia}) \quad \mathbf{R}_{i\alpha} = (X_{i\alpha}, Y_{i\alpha}, Z_{i\alpha})$$

où  $M_i$  et  $N_i$  désignent respectivement le nombre d'électrons et de noyaux dans ce sous-système. L'interaction  $\hat{U}_{jk}(\mathbf{r}_{(j,k)}, \mathbf{R}_{(j,k)})$  entre toutes les paires des sous-systèmes est donnée par

$$\begin{aligned} \hat{U}_{jk}(\mathbf{r}_{(j,k)}, \mathbf{R}_{(j,k)}) = & \sum_{a=1}^{M_j} \sum_{b=1}^{M_k} \frac{1}{|\mathbf{r}_{ja} - \mathbf{r}_{kb}|} + \sum_{\alpha=1}^{N_j} \sum_{\beta=1}^{N_k} \frac{Z_{j\alpha} Z_{k\beta}}{|\mathbf{R}_{j\alpha} - \mathbf{R}_{k\beta}|} \\ & - \sum_{a=1}^{M_j} \sum_{\beta=1}^{N_k} \frac{Z_{k\beta}}{|\mathbf{r}_{ja} - \mathbf{R}_{k\beta}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_j} \sum_{b=1}^{M_k} \frac{Z_{j\alpha}}{|\mathbf{r}_{kb} - \mathbf{R}_{j\alpha}|} \end{aligned} \quad (3.15)$$

Donc, l'hamiltonien de notre système total comprenant tous les sous-systèmes interagissant les uns avec les autres s'écrit

$$\hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{W}) = \sum_{j=1}^p \hat{H}_j(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) + \sum_{j=1}^p \sum_{k=1}^{j-1} \hat{U}_{jk}(\mathbf{r}_{(j,k)}; \mathbf{R}_{(j,k)}) \quad (3.16)$$

où

$$\mathbf{u} = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \dots, \mathbf{r}_p) \quad , \quad \mathbf{W} = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, \dots, \mathbf{R}_p) \quad (3.17)$$

Les indices désignent les sous-systèmes. Par l'équation de Schrödinger dépendante du temps (3.4), on obtient l'équation de Schrödinger indépendante du temps du système total composé des  $p$  sous-systèmes

$$\hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \Theta(\mathbf{u}; \mathbf{W}) = E \Theta(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \quad (3.18)$$

où  $\Theta(\mathbf{u}; \mathbf{W})$  représente la fonction d'onde propre (état stationnaire) du système total.

Il existe plusieurs théories permettant de résoudre l'équation aux valeurs propres (3.18) selon les approximations que l'on effectue sur la



fonction d'onde  $\Psi(u;W)$  et sur l'énergie  $E$ . On peut utiliser l'approximation des orbitales moléculaires comme dans l'équation (3.12). Dans ce cas, on estime le recouvrement intermoléculaire non négligeable puisque l'on permet aux électrons d'un sous-système de se retrouver dans les orbitales d'un autre sous-système. Toutefois, cette approche contredit la séparation effectuée sur l'hamiltonien total du système (3.16). On peut aussi aborder le problème par la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger [20] où les énergies et les fonctions d'onde propres du système total s'écrivent en termes des fonctions et des énergies des sous-systèmes indépendants. Enfin, une autre approche qui constitue le coeur de ce travail s'appelle le modèle d'exciton moléculaire. Ce modèle, contrairement à la théorie des perturbations de Rayleigh-Schrödinger, offre l'avantage de décrire le transfert d'énergie électromagnétique dans un agrégat composé de plusieurs molécules, processus spécifique à l'antenne (voir p. 6). Dans la prochaine section, on présente le formalisme.

### C. Modèle d'exciton moléculaire

Le modèle d'exciton moléculaire permet de calculer la nature du changement des énergies de transition intramoléculaire lors de la formation d'agrégats [24, 25, 26]. Les conditions nécessaires à

l'application de ce formalisme se résume ainsi: l'énergie d'interaction intermoléculaire doit être largement inférieure à l'énergie de liaison interne de chaque molécule de telle sorte que l'hamiltonien se décrive par une partie perturbée (l'interaction) et une partie non perturbée (les molécules indépendantes); les molécules composant l'agrégat conservent leur individualité, i.e. le recouvrement intermoléculaire devient négligeable. Dans la présentation du formalisme, nous assumons les fonctions d'onde propres de chaque sous-système non dégénérées et réelles.

On établit une convention de départ pour dénoter les fonctions d'onde propres et leurs énergies associées dans l'équation aux valeurs propres (3.17). On emploie les indices supérieurs pour indiquer le niveau de l'état considéré, i.e.,

$\theta^0(u;w)$	état fondamental	: $E^0_{tot.}$	énergie fondamentale
$\theta^1(u;w)$	premier état excité	: $E^1_{tot.}$	énergie du premier état excité
etc.			

L'équation aux valeurs propres (3.18) pour le niveau fondamental s'écrit

$$\hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \Theta^0(\mathbf{u}; \mathbf{W}) = E_{\text{tot.}}^0 \Theta^0(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \quad (3.19)$$

où  $H_{\text{tot}}(\mathbf{u}; \mathbf{W})$  est donné par l'équation (3.16).

Pour construire la fonction d'onde au niveau fondamental du système total, on considère celui-ci dans l'approximation à l'ordre zéro (sans interaction). L'état fondamental du système se décrit alors par le produit des fonctions d'onde à l'état fondamental des sous-systèmes non perturbés

$$\Theta^0(\mathbf{u}; \mathbf{W}) = \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \dots \Phi_p^0(\mathbf{r}_p; \mathbf{R}_p) \quad (3.20)$$

Notons que nous ne tenons pas compte du fait que les électrons sont non discernables impliquant un recouvrement entre les fonctions d'onde propres de chaque sous-système négligeable. Alors, l'énergie au premier ordre (avec perturbation) du système

$$E_{\text{tot.}}^0 = \int \Theta^0(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \Theta^0(\mathbf{u}; \mathbf{W}) d\mathbf{u}$$

i.e.,

$$E_{\text{tot.}}^0 = \sum_{i=1}^p E_i^0 + \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{i-1} \mathcal{U}_{ij}(\mathbf{r}_{(i,j)}; \mathbf{R}_{(i,j)}) \quad (3.21)$$

où

$$U_{ij}(\mathbf{r}_{(i,j)}; \mathbf{R}_{(i,j)}) = \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \hat{U}_{ij}(\mathbf{r}_{(i,j)}; \mathbf{R}_{(i,j)}) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \quad (3.22)$$

avec

$$\begin{aligned} d\mathbf{r}_i &= d\mathbf{r}_{i1} d\mathbf{r}_{i2} d\mathbf{r}_{i3} \dots d\mathbf{r}_{iN_i} \\ d\mathbf{r}_j &= d\mathbf{r}_{j1} d\mathbf{r}_{j2} d\mathbf{r}_{j3} \dots d\mathbf{r}_{jN_j} \end{aligned}$$

où  $N_i$  et  $N_j$  désignent le nombre d'électrons du sous-système  $i$  et  $j$  respectivement. Ce terme (3.22) représente l'énergie d'interaction de Van der Waals [25] entre les états fondamentaux des sous-systèmes  $i$  et  $j$ . Il abaisse l'énergie du système total. Le terme  $E_i^0$  représente l'énergie fondamentale du sous-système  $i$  auquel correspond la fonction d'onde propre  $\Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i)$ .

La fonction d'onde propre du système total à l'état excité  $\Theta^k(\mathbf{u}; \mathbf{w})$  se construit en termes des  $p$  configurations excitées localement (i.e sur chaque sous-système)

$$\Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \prod_{j=1}^p \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j)$$

où  $\Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i)$  représente la fonction d'onde propre à état excité  $k$  du sous-système  $i$  associée à l'énergie  $E_i^k$ . Alors, la fonction d'onde de notre système est une combinaison linéaire de toutes les configurations excitées localement

$$\Phi^k(\mathbf{u}; \mathbf{w}) = \sum_{i=1}^p C_i^k \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \prod_{j=1}^p \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \quad (3.23)$$

On cherche maintenant les valeurs propres  $E^k$  et les coefficients  $C_i^k$  qui doivent satisfaire l'équation de Schrödinger du système total, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{w}) \left[ \sum_{i=1}^p C_i^k \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \prod_{j=1}^p \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \right] = \\ E_{\text{tot.}}^k \left[ \sum_{i=1}^p C_i^k \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \prod_{j=1}^p \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \right] \end{aligned} \quad (3.24)$$

En multipliant de chaque côté de l'équation par

$$\Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_3^0(\mathbf{r}_3; \mathbf{R}_3) \dots \Phi_p^0(\mathbf{r}_p; \mathbf{R}_p)$$

et en intégrant sur toutes les coordonnées électroniques, on trouve une équation de la forme

$$C_1^k (H_{11}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) + C_2^k H_{12}^{kk} + C_3^k H_{13}^{kk} + \dots + C_p^k H_{1p}^{kk} = 0$$

où

$$H_{11}^{kk} = \int \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \dots \Phi_p^0(\mathbf{r}_p; \mathbf{R}_p) \hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{u}; \mathbf{W}) \\ \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \dots \Phi_{l-1}^0(\mathbf{r}_{l-1}; \mathbf{R}_{l-1}) \Phi_l^k(\mathbf{r}_l; \mathbf{R}_l) \Phi_{l+1}^0(\mathbf{r}_{l+1}; \mathbf{R}_{l+1}) \dots \Phi_l^0(\mathbf{r}_l; \mathbf{R}_l) d\mathbf{u} \quad (3.25)$$

avec

$$d\mathbf{u} = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_p$$

$$d\mathbf{r}_i = d\mathbf{r}_{i1} d\mathbf{r}_{i2} d\mathbf{r}_{i3} \dots d\mathbf{r}_{N_i}$$

L'indice supérieur  $kk$  indique que les fonctions d'onde des sous-systèmes 1 et  $l$  sont excités au  $k^{\text{ième}}$  niveau. On répète la même opération en changeant la fonction d'onde excitée,  $p$  fois.



$$\begin{aligned}
H_{11}^{kk} = & E_1^k + \sum_{i=1}^p E_i^0 \\
& + \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{j=1}^p \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \hat{U}_{ij}(\mathbf{r}_{(i,j)}; \mathbf{R}_{(i,j)}) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \\
& \quad (i \neq j) \\
& + \sum_{i=1}^p \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \hat{U}_{ii}(\mathbf{r}_{(i,i)}; \mathbf{R}_{(i,i)}) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_i
\end{aligned}
\tag{3.25a'}$$

et pour  $i \neq j$ ,

$$H_{11} = \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \hat{U}_{ii}(\mathbf{r}_{(i,i)}; \mathbf{R}_{(i,i)}) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_i
\tag{3.25b}$$

où  $H_{11} = H_{11}$  et  $U_{11} = U_{11}$ . Le troisième terme de l'équation (3.25a) représente l'énergie d'interaction entre la  $i^{\text{ème}}$  molécule et la  $j^{\text{ème}}$  molécule à l'état fondamental. Le quatrième terme de cette même équation est l'énergie d'interaction entre la  $i^{\text{ème}}$  molécule dans son état excité  $k$  et la  $i^{\text{ème}}$  molécule dans son état fondamental. Finalement, l'élément de matrice  $H_{11}$  désigne le terme d'énergie d'interaction entre la densité de transition,



$\Phi_i^k \Phi_i^0$  de la molécule  $i$  et la densité de transition,  $\Phi_i^0 \Phi_i^k$  de la molécule  $i$  [24]. L'ensemble (3.26) possède seulement la solution triviale  $C_m^k = 0$  pour chaque  $k$  et  $m$ , sauf si le déterminant suivant est nul

$$(\mathbf{H}^k - \mathbf{I}E_{\text{tot.}}^k) = \begin{bmatrix} (H_{11}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) & H_{12}^{kk} & H_{13}^{kk} & \dots & H_{1p}^{kk} \\ H_{21}^{kk} & (H_{22}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) & \dots & \dots & H_{2p}^{kk} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{p1}^{kk} & H_{p2}^{kk} & \dots & \dots & (H_{pp}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) \end{bmatrix} = 0 \quad (3.27)$$

Cette équation algébrique de degré  $p$  définit  $p$  valeurs de l'énergie propre  $E_{\text{tot.}}^k$ . Pour les trouver, nous utilisons le fait que la matrice  $(\mathbf{H} - \mathbf{I}E_{\text{tot.}}^k)$  est hermitique et donc, qu'il existe une matrice unitaire  $\mathbf{S}$  qui la diagonalise, donnant les énergies propres comme éléments de la diagonale, i.e.,

$$\mathbf{S}^{-1}(\mathbf{H} - \mathbf{I}E_{\text{tot.}}^k)\mathbf{S} = \begin{bmatrix} E_{1\text{tot.}}^k & & & & \\ & E_{2\text{tot.}}^k & & & \\ & & E_{3\text{tot.}}^k & & \\ & & & \ddots & \\ & 0 & & & E_{p\text{tot.}}^k \end{bmatrix} \quad (3.28)$$

L'ensemble des fonctions d'onde de base orthogonalisées

[illegible]

se transforme en un autre ensemble de fonctions propres orthogonales du système par la matrice unitaire **S** de la façon suivante

$$V = SP$$

où  $\mathbf{P}$  est la matrice colonne des vecteurs de base ci-dessus et  $\mathbf{V}$ , les vecteurs orthogonaux résultants de la transformation.

La matrice  $\mathbf{H}$  donnée par l'expression (3.27) nous donne les valeurs propres de l'énergie pour différents niveaux excités. Nous voulons maintenant obtenir les énergies de transition du système. On modifie la matrice  $\mathbf{H}$  en soustrayant de tous ces éléments de la diagonale l'énergie fondamentale donnée par l'équation (3.21) alors les éléments de matrice diagonaux deviennent

$$(H_{II}^{kk} - E_{tot.}^k)$$

c'est-à-dire que les valeurs propres sont maintenant les énergies de transition des niveaux excités. En utilisant les équations (3.25a) et (3.21), on trouve

$$\begin{aligned}
 H'_{ll} &= E_l^k - E_l^0 \\
 &+ \sum_{i=1}^p \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \hat{U}_{ll}(\mathbf{r}_{(l,i)}; \mathbf{R}_{(l,i)}) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_i \\
 &- \sum_{i=1}^p \iint \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \hat{U}_{ll}(\mathbf{r}_{(l,i)}; \mathbf{R}_{(l,i)}) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_i
 \end{aligned}$$

Les éléments de matrice  $H'_{ll}$  s'expriment par l'équation (3.25b). En effectuant cette opération sur les éléments de la diagonale de la matrice  $\mathbf{H}$ , nous n'avons pas modifié les approximations faites sur les fonctions d'onde propres du système. Donc, les vecteurs propres associés ont la même forme que l'équation (3.23) mais avec de nouveaux coefficients, i.e.,

$$\Theta^k(\mathbf{u}; \mathbf{w}) = \sum_{G=1}^p C_G^{k'} \Phi_G^k(\mathbf{r}_G; \mathbf{R}_G) \prod_{D \neq G} \Phi_D^0(\mathbf{r}_D; \mathbf{R}_D) \quad (3.29)$$

Le système d'équations homogènes s'exprime sous la même forme que

l'équation (3.26)

$$C_1^{k'} (H_{11}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) + C_2^{k'} H_{12}^{k'k'} + C_3^{k'} H_{13}^{k'k'} + \dots + C_p^{k'} H_{1p}^{k'k'} = 0$$

$$C_1^{k'} H_{21}^{k'k'} + C_2^{k'} (H_{22}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) + C_3^{k'} H_{23}^{k'k'} + \dots + C_p^{k'} H_{2p}^{k'k'} = 0$$

$$\dots\dots\dots$$

$$C_1^{k'} H_{p1}^{k'k'} + C_2^{k'} H_{p2}^{k'k'} + \dots\dots\dots + C_p^{k'} (H_{pp}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) = 0$$

Ce système d'équations possède la solution triviale  $C_i^{k'} = 0$  pour tout  $k'$  et  $i$  sauf si le déterminant suivant est nul

$$(H^{k'} - I E_{\text{trans.}}^{k'}) = \begin{bmatrix} (H_{11}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) & H_{12}^{k'k'} & H_{13}^{k'k'} & \dots & H_{1p}^{k'k'} \\ H_{21}^{k'k'} & (H_{22}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) & \dots & \dots & H_{2p}^{k'k'} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ H_{p1}^{k'k'} & H_{p2}^{k'k'} & \dots & \dots & (H_{pp}^{k'k'} - E_{\text{trans.}}^{k'}) \end{bmatrix} = 0$$

avec  $I$ , la matrice unitaire. La matrice des coefficients s'écrit comme

$$C' = \begin{bmatrix} C_1^{k'} \\ C_2^{k'} \\ \dots \\ C_p^{k'} \end{bmatrix}$$

Mais, puisque nous avons la relation suivante

$$(\mathbf{H}' - \mathbf{I}E_{\text{trans.}}^k) \mathbf{C}' = (\mathbf{H} - \mathbf{I}E_{\text{tot.}}^0 - \mathbf{I}E_{\text{trans.}}^k) \mathbf{C}' = (\mathbf{H} - E_{\text{tot.}}^k) \mathbf{C}' = \mathbf{0}$$

et que l'ensemble (3.26) donne  $(\mathbf{H} - E_{\text{tot.}}^k) \mathbf{C} = \mathbf{0}$  alors nous obtenons

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}'$$

Donc, la même matrice unitaire  $\mathbf{S}$  qui diagonalisait  $\mathbf{H}$ , diagonalisera aussi  $\mathbf{H}'$  ; les vecteurs propres demeurent identiques mais les énergies propres désignent les énergies de transition de l'état fondamental. Les coefficients se déterminent à partir du système d'équations ci-dessus. Notons que les états excités de chaque molécule présentés dans ce formalisme ne possèdent pas la propriété d'état stationnaire; si une molécule de l'agrégat est excitée, l'énergie d'excitation ne restera pas localisée sur cette molécule mais se délocalisera sur les autres molécules. La perturbation des molécules de l'agrégat est en phase.

#### D. Application du modèle d'exciton au dimère

Dans cette partie, nous appliquons le formalisme exposé

précédemment pour un dimère composé de deux molécules quelconques. On n'impose pas une orientation relative particulière entre les deux molécules.

Les hamiltoniens des molécules 1 et 2 sont respectivement donnés par

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) = & -\frac{1}{2} \sum_{a=1}^{M_1} \nabla_{1a}^2 + \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{M_1} \frac{1}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{r}_{1b}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{a=1}^{M_1} \frac{Z_{1\alpha}}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{R}_{1\alpha}|} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N_1} \frac{Z_{1\alpha} Z_{1\beta}}{|\mathbf{R}_{1\alpha} - \mathbf{R}_{1\beta}|} \end{aligned} \quad (3.30)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) = & -\frac{1}{2} \sum_{a=1}^{M_2} \nabla_{2a}^2 + \frac{1}{2} \sum_{a,b=1}^{M_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_{2a} - \mathbf{r}_{2b}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_2} \sum_{a=1}^{M_2} \frac{Z_{2\alpha}}{|\mathbf{r}_{2a} - \mathbf{R}_{2\alpha}|} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N_2} \frac{Z_{2\alpha} Z_{2\beta}}{|\mathbf{R}_{2\alpha} - \mathbf{R}_{2\beta}|} \end{aligned} \quad (3.31)$$

L'indice prime sur la sommation signifie que  $a$  et  $\alpha$  sont différents de  $b$  et  $\beta$  respectivement. En considérant les deux molécules indépendantes, les

équations aux valeurs propres de chacune d'elles sont données par

$$\begin{aligned}\hat{H}_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) &= E_1 \Phi_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \\ \hat{H}_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) &= E_2 \Phi_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2)\end{aligned}\quad (3.32)$$

où, pour la molécule 1, on a

$$\mathbf{r}_1 = (\mathbf{r}_{11}, \mathbf{r}_{12}, \mathbf{r}_{13}, \dots, \mathbf{r}_{1M_1}) \quad \mathbf{R}_1 = (\mathbf{R}_{11}, \mathbf{R}_{12}, \mathbf{R}_{13}, \dots, \mathbf{R}_{1N_1})$$

$$\mathbf{r}_{1a} = (x_{1a}, y_{1a}, z_{1a}) \quad \mathbf{R}_{1\alpha} = (X_{1\alpha}, Y_{1\alpha}, Z_{1\alpha})$$

et, pour la molécule 2

$$\mathbf{r}_2 = (\mathbf{r}_{21}, \mathbf{r}_{22}, \mathbf{r}_{23}, \dots, \mathbf{r}_{2M_2}) \quad \mathbf{R}_2 = (\mathbf{R}_{21}, \mathbf{R}_{22}, \mathbf{R}_{23}, \dots, \mathbf{R}_{2N_2})$$

$$\mathbf{r}_{2a} = (x_{2a}, y_{2a}, z_{2a}) \quad \mathbf{R}_{2\alpha} = (X_{2\alpha}, Y_{2\alpha}, Z_{2\alpha})$$

L'interaction électrostatique entre électron-électron, noyau-noyau et électron-noyau des deux molécules s'écrit

$$\begin{aligned}
\hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = & - \sum_{a=1}^{M_1} \sum_{b=1}^{M_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{r}_{2b}|} + \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{\beta=1}^{N_2} \frac{Z_{1\alpha} Z_{2\beta}}{|\mathbf{R}_{1\alpha} - \mathbf{R}_{2\beta}|} \\
& - \sum_{a=1}^{M_1} \sum_{\beta=1}^{N_2} \frac{Z_{2\beta}}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{R}_{2\beta}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{b=1}^{M_2} \frac{Z_{1\alpha}}{|\mathbf{r}_{2b} - \mathbf{R}_{1\alpha}|}
\end{aligned} \tag{3.33}$$

Ainsi, l'hamiltonien de notre système total devient

$$\hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \hat{H}_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) + \hat{H}_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \tag{3.34}$$

La fonction d'onde propre à l'état fondamental  $\Theta^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$  de l'hamiltonien ci-dessus correspond au produit des fonctions d'onde propres à l'état fondamental des deux molécules, i.e.,

$$\Theta^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \tag{3.35}$$

Alors, l'énergie au premier ordre (avec perturbation) pour l'état fondamental  $E_{\text{tot.}}^0$  pour le système total s'écrit

$$\begin{aligned}
E_{\text{tot.}}^0 = & \iint \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \left[ \hat{H}_1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) + \hat{H}_2(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \right] \\
& \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
&= E_1^0 + E_2^0 + \iint \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \\
&\quad \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
&\quad (3.36)
\end{aligned}$$

On simplifie l'écriture de l'expression ci-dessus en utilisant le symbole  $\Delta$  pour remplacer l'intégrale i.e.,

$$E = E_1^0 + E_2^0 + \Delta \quad (3.37)$$

$$\begin{aligned}
\Delta = & \iint \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \\
& (3.38)
\end{aligned}$$

Le troisième terme ( $\Delta$ ) de l'équation (3.37) représente l'énergie d'interaction de Van der Waals entre les états fondamentaux des molécules 1 et 2 [25]. Les deux premiers termes sont les énergies fondamentales des deux molécules.

La fonction d'onde à l'état excité  $k$ ,  $\Theta^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$  s'écrit

$$\Theta^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = C_1^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + C_2^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \quad (3.39)$$

On cherche les valeurs propres et les coefficients satisfaisant l'équation de Schrödinger du système total pour l'état excité, i.e.,

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \left[ C_1^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + C_2^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \\ = E_{\text{tot.}}^k \left[ C_1^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + C_2^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

On multiplie de chaque côté de l'équation par

$$\Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2)$$

et

$$\Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2)$$

puis, on intègre sur les coordonnées électroniques de chaque molécule. On obtient un système d'équations homogènes

$$C_1^k (H_{11}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) + C_2^k H_{12}^{kk} = 0$$

$$C_1^k H_{21}^{kk} + C_2^k (H_{22}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) = 0$$

(3.41)

où, comme dans l'équation (3.25a), nous obtenons

$$H_{ij}^{kk} = \iint \Phi_i^k(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^k(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) \hat{H}_{\text{tot.}}(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j; \mathbf{R}_i, \mathbf{R}_j) \Phi_i^0(\mathbf{r}_i; \mathbf{R}_i) \Phi_j^0(\mathbf{r}_j; \mathbf{R}_j) d\mathbf{r}_i d\mathbf{r}_j \quad (3.42)$$

Nous pouvons réécrire l'équation ci-dessus en substituant l'hamiltonien total du système (3.33) dans les éléments de matrice (3.42). Alors, ces éléments de matrice s'écrivent (voir 3.25a' et 3.25b)

$$i=j=1$$

$$H_{11}^{kk} = E_1^k + E_2^0 + \iint \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$i=1, j=2$$

$$H_{12}^{kk} = \iint \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$i=j=2$

$$H_{22}^{kk} = E_2^k + E_1^0 + \iint \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \hat{U}_{21}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (3.43)$$

où  $E_1^k$  et  $E_2^k$  représentent les énergies à l'état excité  $k$  de la molécule 1 et 2, respectivement avec  $E_1^0$  et  $E_2^0$ , leur énergie fondamentale et  $H_{12}^{kk} = H_{21}^{kk}$ . Pour simplifier la notation, nous allons exprimer les intégrales des éléments  $H_{11}^{kk}$  et  $H_{22}^{kk}$  en terme des symboles  $\sigma_1^k$  et  $\sigma_2^k$ , respectivement

$$H_{11}^{kk} = E_1^k + E_2^0 + \sigma_1^k$$

$$H_{22}^{kk} = E_2^k + E_1^0 + \sigma_2^k \quad (3.44)$$

avec

$$\sigma_1^k = \iint \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$\sigma_2^k = \iint \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \hat{U}_{21}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (3.45)$$

Donc, pour trouver les différentes valeurs de l'énergie des niveaux excités, nous devons résoudre l'équation algébrique du déterminant suivant (voir 3.27)

$$(\mathbf{H}^k - E_{\text{tot.}}^k) = \begin{bmatrix} E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_{\text{tot.}}^k & H_{12}^{kk} \\ H_{12}^{kk} & E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - E_{\text{tot.}}^k \end{bmatrix} = 0 \quad (3.46)$$

ou

$$(E_{\text{tot.}}^k)^2 - (H_{11}^{kk} + H_{22}^{kk}) E_{\text{tot.}}^k + (H_{11}^{kk} H_{22}^{kk} - (H_{12}^{kk})^2) = 0$$

Nous obtenons les valeurs de l'énergie suivantes

$$E_{\text{tot.}\pm}^k = \frac{1}{2} (E_1^k + E_2^0 + E_2^k + E_1^0 + \sigma_1^k + \sigma_2^k) \pm \frac{1}{2} \sqrt{\left[ (E_2^k + E_1^0 - E_1^k - E_2^0) + (\sigma_1^k - \sigma_2^k) \right]^2 - 4 \left[ H_{12}^{kk} \right]^2} \quad (3.47)$$

Pour trouver les états quasi-stationnaires de notre système total,

$\Theta_+^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$  et  $\Theta_-^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2)$ , associés à ces énergies, on résout le

système d'équations

$$C_1^k (H_{11}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) - C_2^k H_{12}^{kk} = 0$$

$$C_1^k H_{12}^{kk} - C_2^k (H_{22}^{kk} - E_{\text{tot.}}^k) = 0$$

avec les valeurs de l'énergie données par l'équation 3.47, obtenant ainsi les coefficients moléculaires. Notons que l'on tient compte du fait que la longueur d'onde de la lumière pour des excitations électroniques (noyaux fixes) est beaucoup plus grande que la dimension de l'agrégat (dimère) alors, nous avons une perturbation en phase. Ainsi, en substituant les coefficients dans l'équation (3.39), les vecteurs d'onde propres deviennent pour l'énergie  $E_{+(tot.)}^k$  et  $E_{-(tot.)}^k$  respectivement

$$\Theta_{+}^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ A^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + B^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.48)$$

$$\Theta_{-}^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ B^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) - A^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.49)$$

où les coefficients A et B sont donnés par

$$A^k = \left[ 1 + \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k)^2 + 4(H_{12})^2]^{1/2}} \right]^{1/2}$$

$$B^k = \left[ 1 - \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k)^2 + 4(H_{12})^2]^{1/2}} \right]^{1/2}$$

(3.50)

Pour obtenir les énergies de transition, on doit soustraire l'énergie fondamentale de l'expression ci-dessus. Alors, ces énergies de transition s'expriment comme

$$E_{\text{trans},+}^k = \frac{1}{2} (E_1^k - E_1^0 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_1^k + \sigma_2^k) - \Delta$$

$$+ \frac{1}{2} \sqrt{[E_1^k - E_1^0 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_1^k - \sigma_2^k]^2 + 4[H_{12}^{kk}]^2}$$

(3.51)

Les énergies de transition ainsi que les états propres de l'expression ci-dessus peuvent aussi s'obtenir directement à partir de la matrice hamiltonienne  $\mathbf{H}^{k'}$ . Comme nous l'avons vu précédemment, cette matrice diffère de la matrice  $\mathbf{H}^k$  par  $\mathbf{I}E_{\text{tot}}^k$ , i.e., (voir les éléments de la diagonale à la page 56)

$$\mathbf{H}^{k'} = \begin{bmatrix} E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 & H_{12}^{kk} \\ H_{12}^{kk} & E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2 \end{bmatrix} \quad (3.52)$$

où

$$\Delta_1 = \iint \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

$$\Delta_2 = \iint \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{21}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2$$

Pour obtenir ces énergies, on trouve les racines de l'équation aux valeurs propres



$$(\mathbf{H}' - I E_{\text{trans.}}^k) = 0$$

ce qui donne

$$E_{\text{trans.}\pm}^{'k} = \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2}{2} \pm \sqrt{\left[ \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - (E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2)}{2} \right]^2 + [H_{12}^{kk}]^2} \quad (3.53)$$

En effectuant le même cheminement que précédemment, nous trouvons les états quasi stationnaires suivants

$$\Theta_+^{'k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ A^{'k} \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + B^{'k} \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.54)$$

$$\Theta_-^{'k}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ B^{'k} \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) - A^{'k} \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.55)$$

avec

$$A'^k = \left[ 1 + \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k + \Delta_2}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k + \Delta_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2}$$

$$B'^k = \left[ 1 - \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k + \Delta_2}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k + \Delta_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2}$$

(3.56)

Nous remarquons que si  $U_{12}=U_{21}$  alors  $\Delta_1=\Delta_2=\Delta$  et nous retrouvons l'équation (3.47).

À partir des fonctions d'onde  $\Theta^k_+$  et  $\Theta^k_-$ , on peut obtenir les moments de transition dipolaires de l'état fondamental  $\Theta^0$  par les relations suivantes (en unité atomique)

$$\mathbf{M}_+ = \int \Theta_+^k(r_1, r_2; R_1, R_2) \left[ \sum_{a=1}^{M_1} r_{1a} + \sum_{b=1}^{M_2} r_{2b} \right] \Theta_0(r_1, r_2; R_1, R_2) dr_1 dr_2$$

$$\mathbf{M}_- = \int \Theta_-^k(r_1, r_2; R_1, R_2) \left[ \sum_{a=1}^{M_1} r_{1a} + \sum_{b=1}^{M_2} r_{2b} \right] \Theta_0(r_1, r_2; R_1, R_2) dr_1 dr_2$$

où  $\mathbf{r}_{1a}$  et  $\mathbf{r}_{2b}$  sont les coordonnées électroniques de la molécule 1 et 2 respectivement. En utilisant les expressions (3.35), (3.48), (3.49) et (3.50), les moments de transition dipolaires deviennent

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_- &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ B^k \mathbf{M}_1^{ko} - A^k \mathbf{M}_2^{ko} \right] \\ \mathbf{M}_+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ A^k \mathbf{M}_1^{ko} + B^k \mathbf{M}_2^{ko} \right]\end{aligned}\tag{3.57}$$

avec

$$\begin{aligned}\mathbf{M}_1^{ko} &= \int \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \left[ \sum_{a=1}^{M_1} \mathbf{r}_{1a} \right] \Phi_1^o(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 \\ \mathbf{M}_2^{ko} &= \int \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \left[ \sum_{b=1}^{M_2} \mathbf{r}_{2b} \right] \Phi_2^o(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_2\end{aligned}\tag{3.58}$$

les moments de transition dipolaires des molécules 1 et 2 respectivement.

Nous avons à présent obtenu les équations de base pour calculer les

énergies de transition d'un dimère. Dans le prochain chapitre, on adapte ces équations au modèle du dimère de chlorophylle a avec ses contraintes supplémentaires pour établir les énergies de transition associées et leurs fonctions d'onde.

## CHAPITRE IV

### ENERGIES DE TRANSITION DU DIMERE DE CHLOROPHYLLE a : APPROXIMATION DIPOLE-DIPOLE

#### A. Approche

Le formalisme exposé dans le chapitre précédent permet maintenant de calculer les énergies de transition du modèle du dimère de chlorophylle a exposé dans le second chapitre ainsi que les moments de transition dipolaires associés. Les équations (3.48), (3.49), (3.50), (3.51), (3.57) et (3.58) constituent notre point de départ. Les énergies de transition pour un dimère composé de molécules quelconques s'écrivent

$$E_{\text{trans},\pm}^k = \frac{1}{2} (E_1^k - E_1^0 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_1^k + \sigma_2^k) - \Delta$$

$$\pm \frac{1}{2} \sqrt{\left[ E_1^k - E_1^0 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_1^k - \sigma_2^k \right]^2 + 4 \left[ H_{12}^{kk} \right]^2}$$

(3.51)

avec leur fonction d'onde associée

$$\Theta_+^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ A^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + B^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.48)$$

$$\Theta_-^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ B^k \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) - A^k \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (3.49)$$

où

$$A^k = \left[ 1 + \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k)^2 + 4(H_{12})^2]^{1/2}} \right]^{1/2}$$

$$B^k = \left[ 1 - \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k}{[(E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - E_2^k + E_2^0 - \sigma_2^k)^2 + 4(H_{12})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \quad (3.50)$$

Les moments de transition dipolaires s'écrivent

$$\mathbf{M}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ B^k \mathbf{M}_1^{k0} - A^k \mathbf{M}_2^{k0} \right]$$

$$\mathbf{M}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ A^k \mathbf{M}_1^{ko} + B^k \mathbf{M}_2^{ko} \right] \quad (3.57)$$

avec

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1^{ko} &= \int \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \left[ \sum_{a=1}^{M_1} \mathbf{r}_{1a} \right] \Phi_1^o(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 \\ \mathbf{M}_2^{ko} &= \int \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \left[ \sum_{b=1}^{M_2} \mathbf{r}_{2b} \right] \Phi_2^o(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_2 \end{aligned} \quad (3.58)$$

où  $\mathbf{r}_{1a}$  et  $\mathbf{r}_{2b}$  sont les coordonnées électroniques des molécules 1 et 2 respectivement.

L'application de ces expressions à notre modèle de dimère exigeait que ce modèle satisfasse les conditions de base suivantes :

- (a) L'énergie d'interaction intermoléculaire est largement inférieure à l'énergie de liaison interne de chaque molécule.

- (b) Les molécules composant l'agrégat conservent leur individualité  
 i.e., le recouvrement entre les fonctions d'onde de ces molécules  
 devient négligeable. Ainsi, l'interaction intermoléculaire a pour  
 effet de perturber les niveaux d'énergie de chacune des molécules;  
 le photon excite les molécule de l'agrégat séparément.

Mais, le modèle du dimère du présent travail se décrit par certaines  
 contraintes supplémentaires. Nous devons donc en tenir compte dans les  
 expressions ci-dessus. Ces approximations se résument comme suit:

(c) Energie de liaison :

- \_ lien cétone  $C=O \cdots Mg$
- \_ interaction dipôle-dipôle

(d) Structure des molécules de chlorophylle a :

- \_ rigide
- \_ non perturbée par l'interaction dipôle-dipôle

(e) Chaîne phytyle

- \_ aucun effet sur l'association (orientation relative)



– aucun effet sur les moments dipolaires

(f) Energies de transition du dimère

– orientation relative non perturbée lors de la transition électronique

On impose maintenant ces contraintes supplémentaires aux équations de départ (3.48), (3.49), (3.50), (3.51), (3.57) et (3.58) afin d'obtenir des énergies de transition, leur fonction d'onde associée et les moments de transition dipolaires conformes au modèle du dimère du présent travail.

B. Composantes du dimère : deux molécules de chlorophylle a

Dans le modèle, on travaille avec deux composantes identiques (pas symétriques), les molécules de chlorophylle a. Ainsi, à l'état fondamental, les molécules indépendantes possèdent la même énergie fondamentale et, aux états excités, les mêmes niveaux d'énergie, i.e.,

$$E_1^k = E_2^k, \quad E_1^0 = E_2^0$$

L'équation (3.47) devient alors

$$E_{\text{trans.}\pm}^k = E_1^k - E_1^0 + \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2) - \Delta \pm \frac{1}{2} \sqrt{[\sigma_1 + \sigma_2]^2 + 4[H_{12}^{kk}]^2} \quad (4.1)$$

Les premier et deuxième termes désignent l'énergie à l'état excité  $k$  et l'énergie fondamentale respectivement. Le terme  $H_{12}$  est le terme d'échange entre les molécules 1 et 2. Les troisième et quatrième termes représentent la différence entre le terme de Van der Waals à l'état excité et le terme de Van der Waals à l'état fondamental pour les molécules 1 et 2 respectivement [25]. Les fonctions d'onde (3.48) et (3.49) se réécrivent

$$\begin{aligned} \Theta_+^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \end{aligned} \quad (4.2)$$

$$\begin{aligned}
\Theta_{-}^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \\
& - \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2)
\end{aligned}
\tag{4.3}$$

Les moments de transition dipolaires donnés par les équations (3.57) et (3.58) sont

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_{-} = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \mathbf{M}_1^{ko} \\
& + \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \mathbf{M}_2^{ko}
\end{aligned}
\tag{3.57a}$$

$$\mathbf{M}_{+} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 + \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} \mathbf{M}_1^{ko}$$

$$-\frac{1}{\sqrt{2}} \left[ 1 - \frac{\sigma_1 - \sigma_2}{[(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4(H_{12}^{kk})^2]^{1/2}} \right]^{1/2} M_2^{k0} \quad (3.57b)$$

Le terme  $H_{12}$  décrit la délocalisation de l'excitation, les termes  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  décrivent la localisation de l'excitation sur les molécules 1 et 2 et,  $\Delta$  décrit l'interaction entre les deux molécules à l'état fondamental. Lors de l'excitation de l'agrégat, l'énergie se transfère plus facilement si les niveaux vibrationnels intramoléculaires changent peu, c'est-à-dire si les fonctions d'onde respectent l'approximation de Born-Oppenheimer [26]. Or, nous avons utilisé l'approximation de Born-Oppenheimer. Donc, on peut négliger les termes  $\sigma_1$  et  $\sigma_2$  dans les équations ci-dessus. Ceci est illustré dans la figure 9. Les équations deviennent

$$E_{\text{trans. } \pm}^k = E_1^k - E_1^0 \pm H_{12}^{kk} \quad (4.4)$$

où

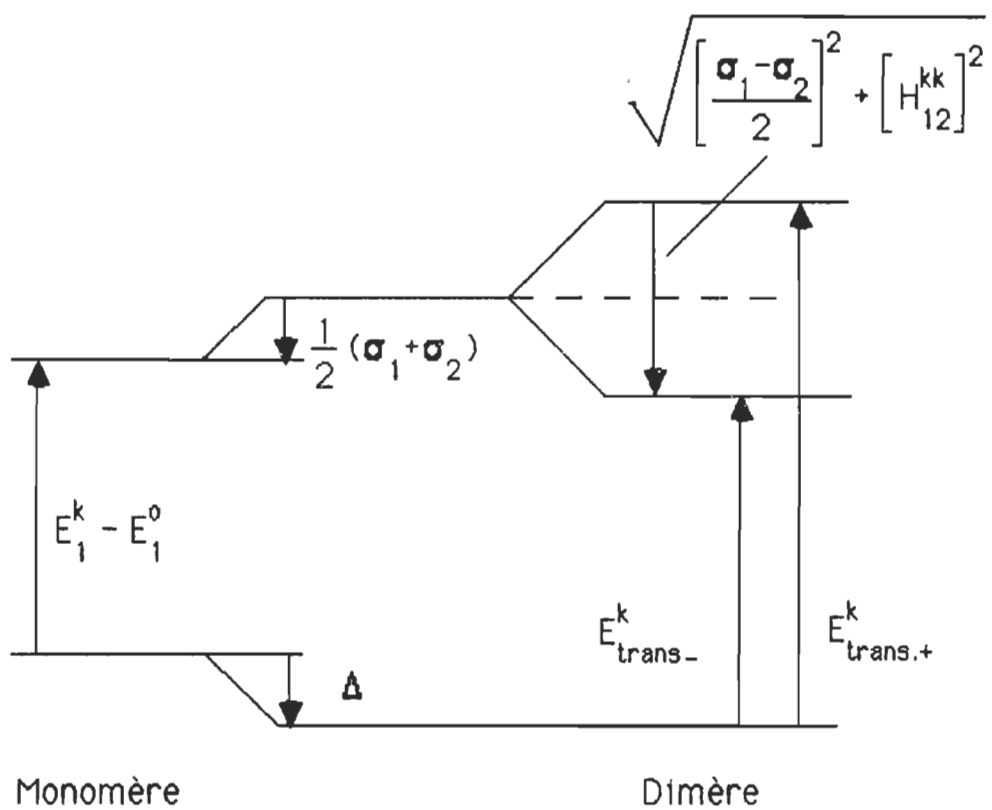


Figure 9. Schéma d'une séparation d'un niveau d'énergie dans le dimère [8]

$$H_{12}^{kk} = \iint \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \quad (3.44')$$

Les fonctions d'onde propres associées à ces énergies sont respectivement

$$\Theta_+^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) + \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (4.5)$$

$$\Theta_-^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) - \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \right] \quad (4.6)$$

L'équation (4.4) nous dit que les niveaux d'énergie de la molécule de chlorophylle a dans le dimère diffèrent de ceux de la chlorophylle a monomère par la valeur de l'énergie d'interaction intermoléculaire  $H_{12}$ . Il résulte donc un déplacement spectral de la bande rouge de la chlorophylle a de la figure 4 sans toutefois la déformer. Les équations (4.5) et (4.6) nous disent aussi que lors d'une mesure, la probabilité de trouver la molécule 1, comme la molécule 2, à l'état excité est d'une demie.

Les moments de transition dipolaires associés sont

$$\mathbf{M}_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{M}_1^{ko} + \mathbf{M}_2^{ko}] \quad (3.57c)$$

$$\mathbf{M}_- = \frac{1}{\sqrt{2}} [\mathbf{M}_1^{ko} - \mathbf{M}_2^{ko}] \quad (3.57d)$$

### C. Approximation dipôle-dipôle

Dans le modèle, on considère les molécules comme deux dipôles qui interagissent l'un avec l'autre. L'équation (3.32) exprimant l'énergie d'interaction intermoléculaire  $\hat{U}_{12}$  pour des distributions de charges incluant tous les termes multipolaires,

$$\begin{aligned} \hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2) = & \sum_{a=1}^{M_1} \sum_{b=1}^{M_2} \frac{1}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{r}_{2b}|} + \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{\beta=1}^{N_2} \frac{Z_{1\alpha} Z_{2\beta}}{|\mathbf{R}_{1\alpha} - \mathbf{R}_{2\beta}|} \\ & - \sum_{a=1}^{M_1} \sum_{\beta=1}^{N_2} \frac{Z_{2\beta}}{|\mathbf{r}_{1a} - \mathbf{R}_{2\beta}|} - \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{b=1}^{M_2} \frac{Z_{1\alpha}}{|\mathbf{r}_{2b} - \mathbf{R}_{1\alpha}|} \end{aligned} \quad (3.32)$$

nous devons employer l'expression qui donne seulement l'énergie d'interaction dipôle-dipôle, i. e., (en unité atomique) [27]

$$\hat{U}_{12}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{s^3} \left[ \sum_{a=1}^{M_1} \mathbf{r}_{1a} \cdot \sum_{b=1}^{M_2} \mathbf{r}_{2b} - 3 \left( \sum_{a=1}^{M_1} \mathbf{r}_{1a} \cdot \mathbf{n} \right) \left( \sum_{b=1}^{M_2} \mathbf{r}_{2b} \cdot \mathbf{n} \right) \right] \quad (4.7)$$

où  $s$  signifie la distance entre les deux centres atomiques des molécules 1 et 2 et,  $\mathbf{r}_{1a}$  et  $\mathbf{r}_{2b}$  désignent les coordonnées électroniques des molécules 1 et 2 respectivement. En substituant (4.7) dans (3.44'), on obtient

$$H_{12}^{kk} = \left[ \mathbf{M}_1^{k0} \cdot \mathbf{M}_2^{k0} - 3 (\mathbf{M}_1^{k0} \cdot \mathbf{n}) (\mathbf{M}_2^{k0} \cdot \mathbf{n}) \right] \frac{1}{s^3} \quad (4.8)$$

où

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1^{k0} &= \int \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \left[ \sum_{a=1}^{M_1} \mathbf{r}_{1a} \right] \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_1 \\ \mathbf{M}_2^{k0} &= \int \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) \left[ \sum_{b=1}^{M_2} \mathbf{r}_{2b} \right] \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_2 \end{aligned} \quad (4.9)$$



où  $\hat{n}$  correspond au vecteur unitaire le long de  $s$

$$\hat{n} = \frac{s}{s} \quad (4.10)$$

Les équations (4.9) représentent les moments de transition dipolaires de la molécule 1 et 2 entre leur état excité  $k$  et leur état fondamental. Les énergies de transition du dimère s'expriment maintenant par l'équation suivante (éq. 4.4)

$$E_{\text{trans},\pm}^k = E_1^k + E_1^0 \pm \left[ \mathbf{M}_1^{k0} \cdot \mathbf{M}_2^{k0} - 3 (\mathbf{M}_1^{k0} \cdot \mathbf{n})(\mathbf{M}_2^{k0} \cdot \mathbf{n}) \right] \frac{1}{s^3} \quad (4.11)$$

#### D. Fonctions d'onde de la méthode SCMO-PPP

L'évaluation des expressions (4.9) et, par conséquent, de l'équation (4.11) nécessite la connaissance des fonctions d'onde de la chlorophylle a. Antippa et al. [9] ont eu recours aux résultats de Weiss pour déterminer l'orientation relative dans le modèle du dimère. Nous allons aussi utilisé les approximations sur les fonctions d'onde de la méthode SCMO-PPP

"Quatre orbitales" [12, 28, 29] associées directement à ces résultats (voir Annexe A). Dans cette partie du travail, nous appliquons ces approximations sur les fonctions d'onde  $\Phi_1^0$ ,  $\Phi_2^0$ ,  $\Phi_1^k$  et  $\Phi_2^k$  de façon à obtenir les énergies de transition et les moments dipolaires de transition.

Jusqu'à présent, nous avons assumé la validité de l'approximation de Born-Openheimer avec noyaux fixes sur les fonctions d'onde  $\Phi_1^0$ ,  $\Phi_2^0$ ,  $\Phi_1^k$  et  $\Phi_2^k$  i.e.,

$$\begin{aligned}\Phi_1^0(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1) &\approx \Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) & \Phi_1^k(\mathbf{r}_1, \mathbf{R}_1) &\approx \Phi_1^k(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) \\ \Phi_2^0(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2) &\approx \Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) & \Phi_2^k(\mathbf{r}_2, \mathbf{R}_2) &\approx \Phi_2^k(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2)\end{aligned}$$

Maintenant nous supposons que chacune des fonctions d'onde ci-dessus s'écrit comme une combinaison de fonctions d'onde à un électron appelées les orbitales moléculaires. Par exemple, la fonction d'onde  $\Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1)$  s'exprime comme

$$\Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) = \chi_{11}(\mathbf{r}_{11}; \mathbf{R}_1) \chi_{12}(\mathbf{r}_{12}; \mathbf{R}_1) \chi_{13}(\mathbf{r}_{13}; \mathbf{R}_1) \dots \chi_{1M_1}(\mathbf{r}_{M_1}; \mathbf{R}_1)$$

où  $\chi_{ij}(\mathbf{r}_{ij}; \mathbf{R}_1)$  désigne l'orbitale moléculaire du  $j^{\text{ème}}$  électron de la molécule 1

avec les coordonnées nucléaires  $\mathbf{R}_1 = (\mathbf{R}_{11}, \mathbf{R}_{12}, \dots, \mathbf{R}_{1N_1})$ . Si on inclut le spin de l'électron et que l'on respecte le principe de Pauli, l'état fondamental de la molécule s'exprime avec un seul déterminant de Slater par couche complète, c'est-à-dire deux électrons par orbitale moléculaire. Alors, pour les molécules 1 et 2 qui comprennent  $2T$  électrons et  $T$  orbitales, les fonctions d'onde sont respectivement

$$\Phi_1^0(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) = \frac{1}{\sqrt{(2T)!}} \sum_{\mathbf{P}} (-1)^{P_{\mathbf{P}}} (\chi_{11}(\mathbf{r}_{11}; \mathbf{R}_1) \alpha(1) \chi_{11}(\mathbf{r}_{12}; \mathbf{R}_1) \beta(2) \dots \chi_{1T}(\mathbf{r}_{1(2T)}; \mathbf{R}_1) \beta(2T)) \quad (4.12)$$

$$\Phi_2^0(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) = \frac{1}{\sqrt{(2T)!}} \sum_{\mathbf{P}} (-1)^{P_{\mathbf{P}}} (\chi_{21}(\mathbf{r}_{21}; \mathbf{R}_1) \alpha(1) \chi_{21}(\mathbf{r}_{22}; \mathbf{R}_1) \beta(2) \dots \chi_{2T}(\mathbf{r}_{2(2T)}; \mathbf{R}_1) \beta(2T)) \quad (4.13)$$

où l'indice entre parenthèse du spin dénote le numéro de l'électron,  $\mathbf{P}$  est l'opérateur de permutation et  $(-1)^{P_{\mathbf{P}}}$  correspond à  $+1$  ou  $-1$  pour des permutations paires ou impaires respectivement.

Pour toutes les orbitales, on sépare les électrons internes et les électrons sigma des électrons pi : on tient compte de l'excitation des électrons pi seulement. Cette dernière hypothèse est valide généralement pour des molécules aromatiques dans la région optique et donc s'applique au modèle du dimère [12]. En considérant l'état excité  $\Phi^1$  comme un état singulet correspondant à une configuration dont un électron est excité de l'orbitale moléculaire occupée la plus élevée (HOMO),  $\chi_{(T)}$ , à l'orbitale moléculaire inoccupée la moins élevée (LUMO),  $\chi_{(T+1)}$  alors les fonctions d'onde excitées des molécules 1 et 2 s'écrivent respectivement

$$\begin{aligned} \Phi_1^1(\mathbf{r}_1; \mathbf{R}_1) = & \frac{1}{\sqrt{2(2T)!}} \left\{ \sum_P (-1)^P P [\chi_{11}(\mathbf{r}_{11}; \mathbf{R}_1) \alpha(1) \chi_{11}(\mathbf{r}_{12}; \mathbf{R}_1) \beta(2) \dots \right. \\ & \chi_{1T}(\mathbf{r}_{1(2T-1)}; \mathbf{R}_1) \alpha(2T-1) \chi_{1(T+1)}(\mathbf{r}_{1(2T)}; \mathbf{R}_1) \alpha(2T)] + \\ & \sum_P (-1)^P P [\chi_{11}(\mathbf{r}_{11}; \mathbf{R}_1) \alpha(1) \chi_{11}(\mathbf{r}_{12}; \mathbf{R}_1) \beta(2) \dots \\ & \left. \chi_{1T}(\mathbf{r}_{1(2T-1)}; \mathbf{R}_1) \alpha(2T-1) \chi_{1(T+1)}(\mathbf{r}_{1(2T)}; \mathbf{R}_1) \beta(2T)] \right\} \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
\Phi_2^1(\mathbf{r}_2; \mathbf{R}_2) = & \frac{1}{\sqrt{2(2T)!}} \left\{ \sum_P (-1)^P \rho [\chi_{21}(\mathbf{r}_{21}; \mathbf{R}_2) \alpha(1) \chi_{21}(\mathbf{r}_{22}; \mathbf{R}_2) \beta(2) \dots \right. \\
& \chi_{2T}(\mathbf{r}_{2(2T-1)}; \mathbf{R}_2) \alpha(2T-1) \chi_{2(T+1)}(\mathbf{r}_{2(2T)}; \mathbf{R}_2) \alpha(2T)] + \\
& \sum_P (-1)^P \rho [\chi_{21}(\mathbf{r}_{21}; \mathbf{R}_2) \alpha(1) \chi_{21}(\mathbf{r}_{22}; \mathbf{R}_2) \beta(2) \dots \\
& \left. \chi_{2T}(\mathbf{r}_{2(2T-1)}; \mathbf{R}_2) \alpha(2T-1) \chi_{2(T+1)}(\mathbf{r}_{2(2T)}; \mathbf{R}_2) \beta(2T)] \right\}
\end{aligned}
\tag{4.15}$$

Nous pouvons assumer les orbitales moléculaires orthonormées sans perte de généralité. Si l'on substitue ces expressions (4.14) et (4.15) pour les fonctions d'onde dans les équations (4.9) donnant les moments de transition dipolaires, on obtient pour les molécules 1 et 2 respectivement [23]

$$M_1^{10} = 2^{1/2} \iint \chi_{1(T+1)}(\mathbf{r}_{1(2T)}; \mathbf{R}_1) \left[ \mathbf{r}_{1(2T-1)} + \mathbf{r}_{1(T)} \right] \chi_{1(T)}(\mathbf{r}_{1(2T-1)}; \mathbf{R}_1) d\mathbf{r}_{1(2T)} d\mathbf{r}_{1(2T-1)}
\tag{4.16}$$

$$M_2^{10} = 2^{1/2} \iint \chi_{2(T+1)}(\mathbf{r}_{2(2T)}; \mathbf{R}_2) \left[ \mathbf{r}_{2(2T-1)} + \mathbf{r}_{2(T)} \right] \chi_{2(T)}(\mathbf{r}_{2(2T-1)}; \mathbf{R}_2) d\mathbf{r}_{2(2T)} d\mathbf{r}_{2(2T-1)} \quad (4.17)$$

De ces orbitales moléculaires, on fait maintenant l'hypothèse que chacune d'elles s'écrit comme une combinaison linéaire de fonctions d'onde à un électron qui sont appelées les orbitales atomiques,  $\xi$ . Donc, pour chaque molécule, les orbitales moléculaires s'expriment comme

$$\chi_{1J}(\mathbf{r}_{1J}; \mathbf{R}_{1J}) = \sum_{\eta=1}^{N_1} D_{\eta J}^{(1)} \xi_{\eta}^1(\mathbf{r}_{1J}; \mathbf{R}_{1J}) \quad (4.18)$$

$$\chi_{2K}(\mathbf{r}_{2K}; \mathbf{R}_{2K}) = \sum_{\lambda=1}^{N_2} D_{\lambda K}^{(2)} \xi_{\lambda}^2(\mathbf{r}_{2K}; \mathbf{R}_{2K}) \quad (4.19)$$

où  $D_{\eta J}^{(1)}$  ( $D_{\lambda K}^{(2)}$ ) représentent les coefficients "orbitale moléculaire" de la  $\eta^{\text{ième}}$  ( $\lambda^{\text{ième}}$ ) orbitale atomique centrée autour du  $\eta^{\text{ième}}$  ( $\lambda^{\text{ième}}$ ) atome et  $N_1$ , le nombre total d'atomes contribuant aux électrons. L'indice supérieur du

coefficient désigne la molécule et l'indice inférieur (J ou K) en alphabet latin se rapporte à l'orbitale moléculaire.

On fait l'approximation d'un recouvrement différentiel nul entre les orbitales atomiques, i.e.,

$$\xi_{\eta}^1(r_{1J}; R_{1J}) \xi_{\lambda}^1(r_{1J}; R_{1J}) = \xi_{\eta}^1 \xi_{\lambda}^1 \delta_{\eta\lambda}$$

$$\xi_{\mu}^2(r_{2K}; R_{2K}) \xi_{\chi}^2(r_{2K}; R_{2K}) = \xi_{\mu}^2 \xi_{\chi}^2 \delta_{\mu\chi}$$

De plus, on tient compte du fait que nous assumons la molécule de chlorophylle a comme une molécule aromatique impliquant des moments dipolaires totaux de transition  $\mathbf{M}^{k0}$  (4.16) et (4.17) qui s'écrivent en termes des moments dipolaires distribués où les charges se situent aux centres atomiques. Alors, pour les molécules 1 et 2 respectivement, les équations (4.16) et (4.17) des moments de transition dipolaires deviennent

$$\mathbf{M}_i^{10} = \sqrt{2} \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} \mathbf{R}_{1\alpha} \quad (4.20)$$

$$M_{2}^{10} = \sqrt{2} \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} R_{2\beta} \quad (4.21)$$

Le vecteur  $R_{1\alpha}$  ( $R_{2\beta}$ ) représente la position d'équilibre nucléaire du  $\alpha^{\text{ième}}$  atome ( $\beta^{\text{ième}}$  atome) de la molécule 1 (2) et,  $N_1$  ( $=N_2$ ) désigne le nombre total d'atomes qui contribuent aux électrons. En substituant ces dernières équations dans l'expression de l'interaction dipôle-dipôle (4.8), on a

$$H_{12}^{11} = 2 \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} \left[ R_{1\alpha} \cdot R_{2\beta} - 3 (R_{1\alpha} \cdot \hat{n}) (R_{2\beta} \cdot \hat{n}) \right] \frac{1}{s^3} \quad (4.22)$$

Donc, les énergies de transition du modèle du dimère de chlorophylle a dans l'approximation dipôle-dipôle sont données par



$$E_{\text{trans. } +}^1 = E_1^1 + E_1^0 +$$

$$2 \sum_{\alpha=1}^{N_1} \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} \left[ \mathbf{R}_{1\alpha} \cdot \mathbf{R}_{2\beta} - 3 (\mathbf{R}_{1\alpha} \cdot \hat{\mathbf{n}}) (\mathbf{R}_{2\beta} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \right] \frac{1}{S^3} \quad (4.23)$$

et les moments de transition dipolaires associés (3.51c,d) deviennent

$$\mathbf{M}_+ = \left[ \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} \mathbf{R}_{1\alpha} + \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} \mathbf{R}_{2\beta} \right]$$

$$\mathbf{M}_- = \left[ \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} \mathbf{R}_{1\alpha} - \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} \mathbf{R}_{2\beta} \right] \quad (3.51'')$$

#### E. Système de coordonnées

Pour calculer ces énergies de transition, on utilise les coefficients "orbitale moléculaire" HUMO et LUMO donnés par Weiss [19] que l'on a reproduits dans le tableau 1. Comme Antippa et al. [9] on travaille avec les coordonnées atomiques nucléaires de Kratky et Dunitz [18] (tableau 1 et

Tableau 1

Coefficients HOMO et LUMO de Weiss [19] et les coordonnées atomiques (Å) de Kratky et Dunitz [18]. HOMO et LUMO sont les orbitales atomiques occupée (la plus élevée) et inoccupée (la plus basse) respectivement.

ATOME	COEFFICIENTS		COORDONNEES		
	HOMO	LUMO	X <sub>D</sub>	Y <sub>D</sub>	Z <sub>D</sub>
Mg	0.000	0.000	0.430	0.000	0.000
O(01)	0.105	-0.128	-0.223	-5.383	-3.509
O(02)	0.000	0.000	2.167	-2.808	-4.590
O(03)	0.000	0.000	0.667	-3.733	-5.936
O(04)	0.000	0.000	-0.856	-1.342	-7.803
O(05)	0.000	0.000	0.527	0.383	-8.132
O(06)	0.000	0.000	2.443	-0.053	-0.320
O(07)	0.000	0.000	3.562	-1.855	-2.133
N(01)	0.044	-0.056	0.060	1.977	0.443
N(02)	0.000	-0.237	0.094	-0.487	2.003
N(03)	-0.022	0.239	0.034	-1.956	-0.372
N(04)	-0.053	-0.023	0.016	0.448	-2.095
C(01)	0.279	0.261	-0.004	3.007	-0.458
C(02)	0.154	0.213	-0.095	4.270	0.257
C(03)	-0.150	-0.245	-0.095	3.990	1.580
C(04)	-0.326	-0.210	0.008	2.531	1.705
C(05)	-0.039	0.327	0.001	1.801	2.873
C(06)	0.332	0.145	0.043	0.394	3.034
C(07)	0.184	-0.102	-0.037	-0.303	4.309
C(08)	-0.183	-0.110	-0.056	-1.634	4.021
C(09)	-0.335	0.134	0.042	-1.750	2.572
C(10)	0.038	0.332	0.043	-2.941	1.859
C(11)	0.335	-0.202	0.029	-3.075	0.456
C(12)	0.158	-0.281	-0.035	-4.279	-0.304

Tableau 1 (suite)

ATOME	COEFFICIENTS HOMO	COEFFICIENTS LUMO	X <sub>D</sub>	COORDONNEES Y <sub>D</sub>	Z <sub>D</sub>
C(13)	-0.194	0.196	-0.090	-3.844	-1.642
C(14)	-0.278	0.209	-0.029	-2.431	-1.616
C(15)	0.124	-0.211	-0.055	-1.821	-2.889
C(16)	0.304	-0.133	-0.014	-0.468	-3.128
C(17)	0.000	0.000	-0.017	0.234	-4.478
C(18)	0.000	0.000	0.281	1.702	-4.091
C(19)	-0.286	-0.187	0.091	1.689	-2.592
C(20)	-0.072	-0.195	0.050	2.865	-1.845
C(21)	0.000	0.000	-0.145	5.620	-0.379
C(22)	0.048	-0.025	-0.189	4.973	2.674
C(23)	0.107	0.149	0.324	4.930	3.847
C(24)	0.000	0.000	-0.115	0.353	5.655
C(25)	0.000	0.000	-0.230	-2.761	4.965
C(26)	0.000	0.000	-1.658	-3.237	5.088
C(27)	0.000	0.000	-0.023	-5.673	0.235
C(28)	-0.025	0.107	-0.161	-4.265	-3.005
C(29)	0.000	0.000	-0.125	-2.969	-3.891
C(30)	0.000	0.000	-1.347	0.098	-5.231
C(31)	0.000	0.000	-1.273	0.697	-6.639
C(32)	0.000	0.000	1.687	2.132	-4.461
C(33)	0.000	0.000	1.045	-3.122	-4.817
C(34)	0.000	0.000	1.689	-4.132	-6.863
C(35)	0.000	0.000	-0.518	-0.206	-7.570
C(36)	0.000	0.000	1.308	-0.423	-9.072
C(37)	0.000	0.000	2.478	0.334	-9.499

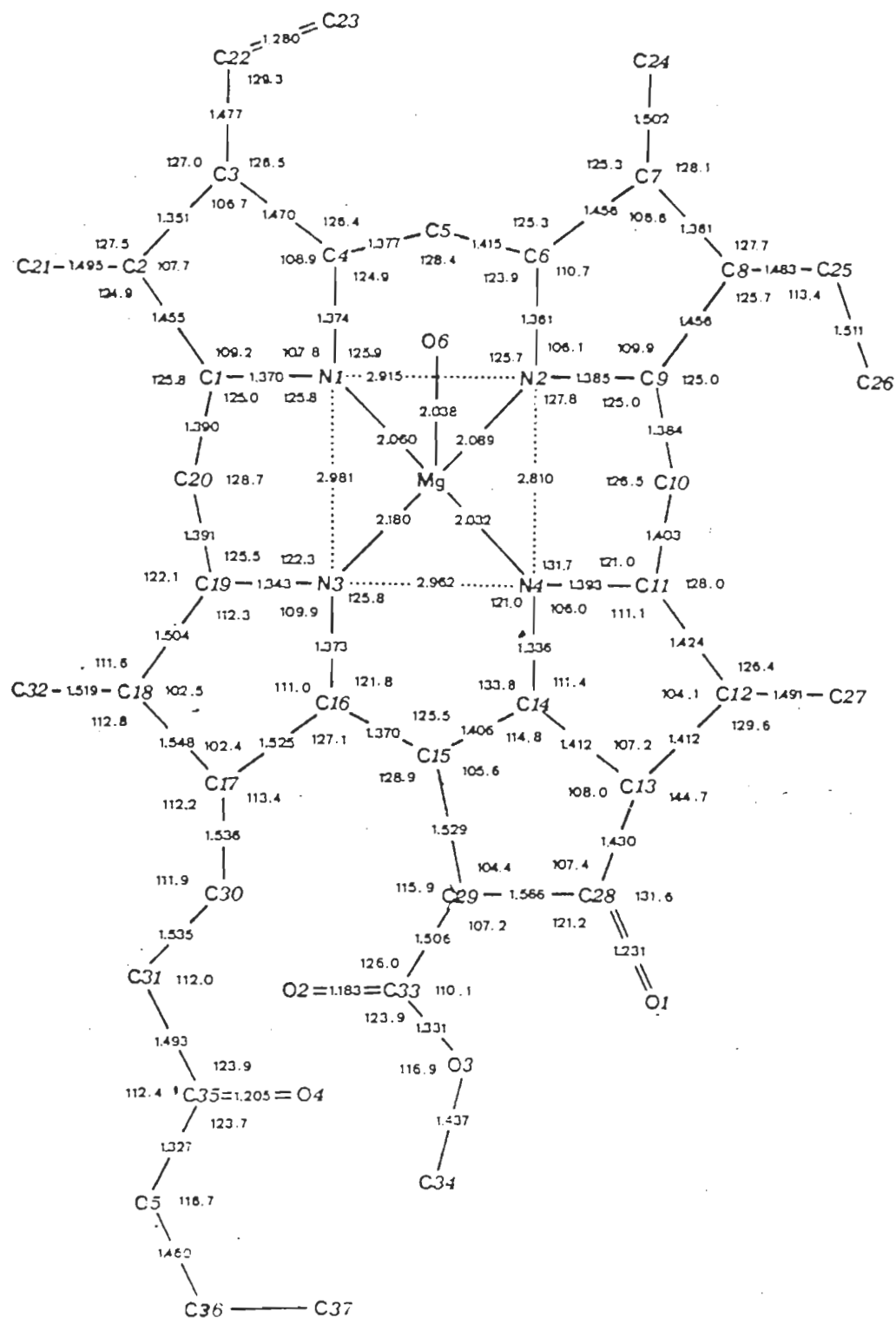


figure 9). On effectue les calculs dans le système de coordonnées non primées (x,y,z). La transformation du système de coordonnées utilisé par Kratky et Dunitz de la molécule 1 au système de coordonnées (x,y,z) est [9,10]

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & +\sin\phi & -\cos\phi \\ 0 & -\cos\phi & -\sin\phi \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_D \\ y_D \\ z_D \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ s_1 \end{bmatrix} \quad (4.24)$$

La transformation du système de coordonnées de Kratky et Dunitz [18] de la molécule 2 au système primé s'écrit

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin\phi & \cos\phi \\ 0 & \cos\phi & \sin\phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_D \\ y_D \\ z_D \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ s_2 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

Et enfin, les coordonnées primées de la molécule 2 aux coordonnées non primées se relient par la transformation suivante

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (\cos\alpha \cos\beta \cos\gamma - \sin\alpha \sin\gamma) & (-\cos\alpha \cos\beta \sin\gamma - \sin\alpha \cos\gamma) & (\cos\alpha \sin\beta) \\ (\sin\alpha \cos\beta \cos\gamma + \cos\alpha \sin\gamma) & (-\sin\alpha \cos\beta \sin\gamma + \cos\alpha \cos\gamma) & (\sin\alpha \sin\beta) \\ (-\sin\beta \cos\gamma) & (\sin\beta \sin\gamma) & (\cos\beta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

Les composantes du moment de transition dipolaire de la molécule 1 dans le système de coordonnées (x,y,z) deviennent

$$M_1^{10}(x) = + \sin\phi M_D^{10}(y) - \cos\phi M_D^{10}(z)$$

$$M_1^{10}(y) = - \cos\phi M_D^{10}(y) - \sin\phi M_D^{10}(z)$$

$$M_1^{10}(z) = M_D^{10}(x) - s_1$$

(4.27)

Et, pour la molécule 2, les composantes du moment de transition dipolaire dans le système de coordonnées (x,y,z) sont

$$\begin{aligned}
 M_2^{10}(x) = & (\cos\alpha \cos\beta \cos\gamma - \sin\alpha \sin\gamma) M_D^{10}(x) + \\
 & (+\cos\alpha \cos\beta \sin\gamma \sin\phi + \sin\alpha \cos\gamma \sin\phi + \cos\alpha \sin\beta \cos\phi) M_D^{10}(y) + \\
 & (-\cos\alpha \cos\beta \sin\gamma \cos\phi + \cos\alpha \sin\beta \sin\phi - \sin\alpha \cos\gamma \cos\phi) M_D^{10}(z) + \\
 & (\cos\alpha \sin\beta) s_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_2^{10}(y) = & (\sin\alpha \cos\beta \cos\gamma + \cos\alpha \sin\gamma) M_D^{10}(x) + \\
 & (+\sin\alpha \cos\beta \sin\gamma \sin\phi - \cos\alpha \cos\gamma \sin\phi + \sin\alpha \sin\beta \cos\phi) M_D^{10}(y) + \\
 & (-\sin\alpha \cos\beta \sin\gamma \cos\phi + \cos\alpha \cos\gamma \cos\phi + \sin\alpha \sin\beta \sin\phi) M_D^{10}(z) + \\
 & (\sin\alpha \sin\beta) s_2
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 M_2^{10}(z) = & (-\sin\beta \cos\gamma) M_0^{10}(x) - (\sin\beta \sin\gamma \sin\phi + \cos\beta \cos\phi) M_0^{10}(y) + \\
 & (+\sin\beta \sin\gamma \cos\phi + \cos\beta \sin\phi) M_0^{10}(z) + (\cos\beta) s_2
 \end{aligned}
 \tag{4.28}$$

Le vecteur unitaire  $\hat{n}$  le long de  $s$  s'exprime, dans ce système de coordonnées, comme

$$n_x = \Gamma(\beta) \cos\alpha \sin\beta \quad n_y = \Gamma(\beta) \sin\alpha \sin\beta \quad n_z = \Gamma(\beta) (\cos\beta + s_1/s_2)
 \tag{4.29}$$

où

$$\Gamma(\beta) = \frac{1}{\sqrt{1 + (s_1/s_2)^2 + 2(s_1/s_2)\cos\beta}}
 \tag{4.30}$$

La distance entre les deux centres géométriques des molécules de chlorophylle a s'écrit

$$s = \frac{s_2}{\Gamma(\beta)}
 \tag{4.31}$$



avec  $\Gamma(\beta)$  donné par l'expression précédente.

## F. Résultats

Avec les transformations suivantes, on peut maintenant évaluer numériquement les énergies de transition du dimère données par l'équation (4.22) et les moments de transition dipolaires de chaque molécule. Toutefois, il est préférable de donner les résultats dans le système d'unité mks plutôt que dans le système d'unité atomique. Alors, l'équation (4.23) s'écrit

$$\begin{aligned}
 E_{\text{trans. } \pm}^1 &= E_1^1 + E_1^0 + \\
 &\frac{2}{4\pi\epsilon_0} \left[ \left[ \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} R_{1\alpha} \right] \cdot \left[ \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} R_{2\beta} \right] \right. \\
 &\quad \left. - 3 \left[ \sum_{\alpha=1}^{N_1} D_{\alpha T}^{(1)} D_{\alpha(T+1)}^{(1)} R_{1\alpha} \cdot \hat{n} \right] \left[ \sum_{\beta=1}^{N_1} D_{\beta T}^{(2)} D_{\beta(T+1)}^{(2)} R_{2\beta} \cdot \hat{n} \right] \right] \frac{1}{s^3}
 \end{aligned}
 \tag{4.32}$$

où les énergies s'expriment en unité électron-volt et les moments de

transition dipolaires en unité de charge  $|e|$ .

Nous avons besoin pour calculer les énergies de transition dans le système de coordonnées (x,y,z) données par l'équation (4.32) de différentes valeurs:

- (a) les valeurs des composantes du moment de transition dipolaire dans le système de coordonnées utilisé par Kratky et Dunitz

$$\mathbf{M}_D^{10} = (0.015, 1.734, 0.455)$$

- (b) les angles d'Euler d'Antippa et a. [10]

$$\alpha = -88.24^\circ, \quad \beta = 85.10^\circ, \quad \gamma = 1.69^\circ$$

- (c) la distance de l'atome de magnésium au plan  $y_D z_D$ ,  $s_1$ ,

$$s_1 = 0.430 \text{ \AA}$$

- (d) la distance entre les atomes de magnésium des molécules de chlorophylle a dans le dimère,  $s_2$ ,

$$s_2 = 8.47 \text{ \AA}$$

(d) l'angle entre l'axe  $z_0$  et l'axe  $z_1$

$$\phi = 33.099^\circ$$

(e) les énergies de transition expérimentales de la chlorophylle a monomère que l'on obtient par la figure 4

$$\lambda = 660.5 \text{ nanomètres} \Rightarrow E_1^1 - E_0^1 = 1.879 \text{ eV}$$

Nous obtenons alors les composantes des moments de transition dipolaires des molécules 1 et 2 données dans le tableau 2.

Dans le tableau 3, on compare les énergies de transition, les forces oscillateurs, les déplacements spectraux, la différence entre les énergies de transition du niveau fondamental au premier niveau excité  $E_{\text{trans},+}^1 - E_{\text{trans},-}^1$  et la moyenne des énergies de transition avec ceux de Shipman et al. [30]. Pour nos résultats, la force oscillateur  $f_s$  associée à la transition entre le niveau fondamental et un niveau excité se calcule par l'équation

Tableau 2

Composantes des moments de transition dipolaire;  $\mathbf{M}_1^{10}$ ,  $\mathbf{M}_2^{10}$  sont les moments de transition dipolaire du niveau fondamental au premier niveau excité des molécules 1 et 2 dans le système de coordonnées (x,y,z) respectivement et  $\mathbf{M}_D^{10}$  le moment de transition de la chlorophylle a dans le système  $(x_D, y_D, z_D)$  utilisé par Kratky et Dunitz [18]; (x,y,z) sont représentés dans la figure 7. Les termes  $\mathbf{M}_+$  et  $\mathbf{M}_-$  sont donnés par l'équation (3.51") et représentent les moments de transition dipolaires associés aux énergies de transition du dimère.

---

	_____ X _____	_____ Y _____	_____ Z _____
$\mathbf{M}_1^{10}$	0.565	-1.701	0.015
$\mathbf{M}_2^{10}$	-0.563	-1.714	0.114
$\mathbf{M}_D^{10}$	0.015	1.734	0.455
$\mathbf{M}_+$	0.002	-3.415	0.129
$\mathbf{M}_-$	1.128	0.013	-0.099

---

Tableau 3

Comparaison entre nos résultats et ceux de Shipman et al. [30].  $E_{\text{trans.}+}^1(E_+)$  et  $E_{\text{trans.}-}^1(E_-)$  sont les énergies de transition du niveau fondamental au premier niveau excité.  $E_k^1$  et  $E_k^0$  ( $k=1,2$ ) représentent l'énergie du premier niveau excité et du niveau fondamental respectivement.  $\Delta_k - \sigma_k$  ( $k=1,2$ ) désignent la différence entre les termes de Van der Waals à l'état fondamental et au premier état excité. La force oscillateur se note  $f_s$ .

	$E_+^1$ (eV)	$\lambda$ (nm)	$f_{s+}$	$E_-^1$ (eV)	$\lambda$ (nm)	$f_{s-}$
Shipman et al.[30]	1.861	666.7	—	1.823	680.7	—
Nos résultats	2.162	574.6	2.21	1.596	778.4	17.9

Tableau 3 (suite)

	$(E^1_+ - E^1_-)$ eV	$(E^1_+ + E^1_-)/2$	$\lambda$ (nm)	$F_1^*$ (eV)	$F_2^{**}$ (eV)
Shipman et al.[30]	0.0385	1.841	674	1.864	1.819
Nos résultats	-0.2830	1.879	660.4	1.879	1.879

$$* F_1 = E^1_1 - E^0_1 + \sigma_1 - \Delta_1$$

$$** F_2 = E^2_1 - E^0_2 + \sigma_2 - \Delta_2$$

suivante [31]

$$f_s = \frac{8\pi^2 mcG}{3 h} \nu D_s = 1.085 * 10^{-5} \nu D_s$$

où  $\nu$  représente la fréquence de la bande d'absorption en  $\text{cm}^{-1}$  et  $D_s$  exprime la force du dipôle en  $\text{\AA}^2$ . Cette force oscillateur du dipôle se relie au moment de transition dipolaire  $M$  par la relation suivante

$$D_s = (M)^2$$

Comme nous l'avons vu dans le second chapitre, Shipman et al [30] obtenait deux composantes de déconvolution de la bande rouge principale du spectre d'absorption des solutions de chlorophylle dans les solvants non polaires. L'une des composantes possédait une longueur d'onde d'onde maximale à 662 nanomètres (1.861 électron-volts) tandis que l'autre possédait une longueur d'onde à 680 nanomètres (1.823 électron-volts). Celles-ci reflétaient les populations relatives de chlorophylles accepteurs et de chlorophylles donneur-accepteur/donneur respectivement. Ainsi, le déplacement spectral (de 662 à 680 nanomètres) provenait non pas de

l'interaction intermoléculaire mais de la chlorophylle donneur.

Pour justifier cette interprétation théoriquement, Shipman et al. [23] se servent de l'équation (3.53)

$$E_{\text{trans},+}^k = \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 + E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2}{2} \pm \sqrt{\left[ \frac{E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1 - (E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2)}{2} \right]^2 + [H_{12}^{kk}]^2} \quad (3.53)$$

sans toutefois effectuer de calcul. Selon eux, lorsqu'on travaille en solution, on ne peut pas assumer l'égalité des termes  $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$  (ou  $U_{12} = U_{21}$ ) comme il est généralement admis. Le solvant affecte différemment les molécules composant le dimère. Ce qui revient à dire que lors d'une excitation de l'agrégat, les molécules ne subiront pas le même déplacement spectral. On associe donc les termes  $E_1^k - E_1^0 + \sigma_1^k - \Delta_1$  et  $E_2^k - E_2^0 + \sigma_2^k - \Delta_2$  aux composantes de déconvolution dont les énergies de transition  $E_{\text{trans},+}^1$  et  $E_{\text{trans},-}^1$  sont respectivement de 1.864 et 1.819 électron-volts. Un seul pic décrit ces absorptions. Il en résulte donc une différence entre ces



énergies d'environ 0.0385 électron-volt qui représente la séparation énergétique de transition (figure 8). Ainsi, on conclut que l'interaction  $H_{12}$  entre les molécules de chlorophylle a produit un déplacement spectral négligeable.

Comparativement aux résultats de Shipman et al.[30], les nôtres sont entièrement théoriques. Nous obtenons une énergie de transition  $E^1_{trans,+}$  de 2.162 électron-volts et une énergie de transition  $E^1_{trans,-}$  de 1.596 électron-volts. Donc, dans le dimère, la molécule de chlorophylle a accepteur, comme la molécule de chlorophylle a donneur, absorbe à des longueurs d'onde maximales de 778.4 et 574.6 nanomètres. L'énergie d'interaction intermoléculaire dipôle-dipôle d'une valeur de -0.283 électron-volt donne une séparation énergétique ( $E^1_+ - E^1_-$ ) de transition de 0.1415 électron-volt. Ainsi, le terme d'interaction  $H_{12}$  produit un déplacement spectral non négligeable d'environ 116 nanomètres. La bande rouge du spectre d'absorption de la chlorophylle a monomère se sépare en deux bandes de même intensité et de même forme lorsque la chlorophylle se trouve dans son état dimère. Dans l'Annexe B, on retrouve différentes valeurs de l'énergie d'interaction en fonction des angles d'Euler.

## G. Discussion

Dans ce présent travail, nous utilisons le modèle d'exciton moléculaire parce qu'il est à la base un modèle mathématique donnant les énergies de transition du dimère de chlorophylle a mais aussi parce qu'il décrit le transfert d'énergie dans un agrégat quelconque, nous dirigeant vers le coeur de notre étude sur l'antenne. Le calcul des énergies de transition par notre modèle repose sur l'hypothèse de la conservation de l'entité de chaque molécule composant l'agrégat. Cette approximation permet de négliger le recouvrement orbital entre les molécules et, par conséquent, de se servir de l'approximation dipôle-dipôle. Ainsi, nous assumons que le terme énergétique associé à ce recouvrement intermoléculaire n'abaisse pas de façon substantielle les niveaux d'énergies. Quoique cette hypothèse puisse paraître exagérée au premier abord, la comparaison des résultats des différentes énergies d'interaction de l'Annexe B montre clairement que le modèle est sensible à l'orientation relative (angles d'Euler) pour chaque conformation du dimère de chlorophylle a et que les déplacements spectraux résultants demeurent raisonnables en ordre de grandeur. L'énergie d'interaction intermoléculaire en valeur absolue varie dans un intervalle de 0.00008 à 0.30144 électron-

volt. Comme les angles d'Euler constituent les seules variables permettant d'évaluer la sensibilité du modèle, nous pouvons supposer la pertinence de l'emploi du modèle d'exiton moléculaire et de l'approximation dipôle-dipôle dans le calcul des énergies de transition du dimère de chlorophylle a.

Les erreurs provenant des approximations sur les fonctions d'onde nous semble d'une moindre importance. En effet, si nous comparons les différents résultats des méthodes théoriques de l'Annexe A, nous constatons que la méthode SCMO-PPP utilisée par Weiss pour déterminer les énergies de transition de la bande rouge de la chlorophylle a donne des valeurs en assez bon accord avec les valeurs expérimentales. Elle est comparable aux autres méthodes théoriques. Ainsi, l'utilisation dans cette méthode des électrons  $\pi$  seulement et des différentes approximations sur les fonctions d'onde donne des énergies de transition de la chlorophylle a monomère aux états fondamental et excités singulets satisfaisantes. De plus, les conclusions sur les populations atomiques et de liaison de cette méthode, en accord avec une autre méthode, appuient le modèle du dimère du présent travail. En effet, les méthodes fragments moléculaires et SCMO-PPP confirment le rôle négligeable de la chaîne phytyle, la première en remplaçant la chaîne par un groupement éthyle et la seconde en omettant la chaîne. Ces méthodes nous disent aussi que les atomes de

l'anneau V de la chlorophylle a sont très fortement nucléophiles impliquant un groupement donneur sur l'anneau, le groupement carbonyle C=O. La méthode SCMO-PPP attribue un rôle négligeable au groupement carbonyle C=O de l'anneau V dans l'excitation correspondant à la bande rouge. Ceci permet donc une liaison du groupement C=O à un autre groupement puisque l'excitation ne perturbera pas la liaison formée. Enfin, la méthode fragments moléculaires concluait que l'introduction de la molécule d'eau produisait un effet local impliquant exclusivement l'atome de magnésium. Donc, l'hypothèse de conservation de l'entité des molécules du dimère dans le modèle d'exciton moléculaire semble se justifier. Ce dernier fait confirmerait aussi la stabilité d'une liaison entre l'atome de magnésium d'une molécule et le groupement  $>C=O$  d'une autre molécule lors de l'excitation. Notons que toutes les méthodes d'électron-libre (FEMO et courants d'anneaux) ne se prêtent pas aux types de calcul effectués dans ce présent travail puisqu'elles donnent une très mauvaise description des populations atomiques et de liaison de la molécule de chlorophylle a.

Ainsi, l'analyse des résultats de présent travail nous conduit aux conclusions suivantes. Le modèle d'exciton moléculaire demeure sensible à l'orientation relative des molécules du dimère. L'emploi de l'approximation

dipôle-dipôle dans ce modèle excitonique produit des résultats conformes à ce que l'on retrouve expérimentalement (en ordre de grandeur). Pour notre modèle de dimère, nos résultats confirment une participation substantielle de l'énergie d'interaction intermoléculaire et un déplacement spectral (116 nanomètres) supérieur à celui prédit par le groupe de Shipman (20 nanomètres). On voit que non seulement les modèles du dimère diffèrent mais aussi la prédiction des énergies de transition. De plus, le modèle du dimère de chlorophylle *a* étant bien représenté par les coefficients LUMO et HOMO de la méthode SCMO-PPP, il paraît raisonnable de conclure que l'influence des approximations apportées sur les fonctions d'onde dans ce présent travail est minime. La comparaison des populations atomiques et de liaison des méthodes théoriques de l'Annexe A indique que nous aurions pu prendre une autre méthode sans modifier grandement les valeurs obtenues des énergies de transition. Bref, l'ensemble des conclusions précédentes nous amènent à envisager une suite dans l'étude des divers types d'agrégats, les oligomères de chlorophylle *a*, avec le modèle d'exciton moléculaire. Nous récolterons alors des informations de l'effet de l'orientation relative sur les énergies de transition selon la longueur de l'agrégat et sur le transfert d'énergie dans ces agrégats. Nous serons alors en mesure de poser un jugement moins téméraire sur

l'utilisation du modèle moléculaire et de l'approximation dipôle-dipôle du présent travail.

En parallèle à l'étude sur les oligomères de chlorophylle a par le modèle d'exciton moléculaire, il serait prudent de regarder le comportement de l'orientation relative lors d'une excitation de l'agrégat. On voit dans l'Annexe A le changement subi par le déplacement spectral lors d'une modification de l'orientation relative. Quoique les résultats de la méthode théorique fragments moléculaires de l'Annexe A nous disent que l'influence de la liaison entre une molécule d'eau et l'atome de magnésium est localisée, pour une liaison entre deux molécules de chlorophylle a, il pourrait en être autrement vue leur grande dimension. Un recouvrement intermoléculaire entre les deux molécules demeure une possibilité. Ainsi, la vérification de l'effet du recouvrement orbital intermoléculaire sur l'orientation relative demeure un point important à éclaircir. Ce dernier travail exigerait que l'on travaille avec une méthode théorique (Annexe A) et non avec le modèle d'exciton moléculaire du présent travail. On vérifierait, encore une fois, par cette démarche la validité des approximations du modèle d'exciton moléculaire. Enfin, la connaissance de l'effet de la température et du solvant sur l'orientation

relative et, par conséquent, sur les énergies de transition constitue un travail de base essentiel à effectuer. Les conditions *in vitro* de l'antenne étant des facteurs déterminants dans la compréhension de la photosynthèse, il deviendrait alors possible d'évaluer plus sérieusement l'interprétation de Shipman et al. [30] selon laquelle les molécules de chlorophylle a composant l'agrégat subissent un déplacement spectral différent avec une seule bande d'absorption dans le rouge. Nos calculs donnent deux bandes d'absorption.

Bref, les résultats théoriques des énergies de transition et des moments de transition dipolaire de ce travail reposent sur un modèle mathématique du dimère de chlorophylle a, ce qui leurs donnent une crédibilité, contrairement à tous les travaux effectués jusqu'à présent. Ils constituent donc un support solide pour la base d'une autre étude.

## CHAPITRE V

### CONCLUSION

Dans ce travail, nous avons calculé par le modèle d'exciton moléculaire les énergies de transition d'un modèle de dimère de chlorophylle a où l'orientation relative avait été déterminée théoriquement. Nos résultats confirment une participation non négligeable de l'énergie d'interaction intermoléculaire dans le déplacement spectral de la bande rouge du spectre d'absorption de la chlorophylle a dans le dimère. La bande rouge du dimère se sépare en deux bandes de même forme et de même intensité que la bande de chlorophylle a monomère mais avec un déplacement de 116 nanomètres vers le rouge et vers le bleu respectivement. Le modèle d'exciton moléculaire se révèle sensible à l'orientation relative des molécules composant le dimère renforçant sa validité dans la description des énergies de transition. Par conséquent, l'utilisation de l'approximation dipôle-dipôle semble raisonnable. Ainsi, il apparaît que le modèle d'exciton moléculaire demeure un bon modèle pour l'étude du trimère de chlorophylle a.

Il nous semble donc que, pour ce moment, le modèle du dimère de



chlorophylle a tel que présenté par Shipman et al. [30] ne soit pas en accord avec les résultats de ce travail. Toutefois, la suite de l'étude sur les oligomères de chlorophylle a pourraient modifier considérablement les résultats. Les études subséquentes renfonceront l'un de ces modèles, donnant ainsi une vue plus juste du complexe antenne et, par le même fait, de la structure partielle de l'unité photosynthétique.

## ANNEXE A

### METHODES THEORIQUES

Plusieurs méthodes théoriques, développées au cours des trente dernières années, permettent de reproduire le spectre d'absorption *in vivo* ainsi que d'étudier les populations atomiques et les populations de liaison de macromolécules. Deux modèles différents les caractérisent, d'une part le modèle du gaz d'électron-libre et d'autre part, la combinaison linéaire d'orbitales atomiques (LCAO). Ce dernier modèle consiste à faire des approximations sur les fonctions d'onde électroniques du système. On les simplifient à un produit, à un déterminant de Slater, ou encore, à une sommation de déterminants de Slater de fonctions d'onde à un électron, les orbitales moléculaires. Puis à leur tour, ces orbitales se réduisent à une combinaison linéaire d'orbitales atomiques.

L'application de ce traitement mathématique aux porphyrines et ses dérivés facilitent le passage aux molécules de chlorophylle (fig. 3). Parmi les nombreux essais pour vérifier ou améliorer ces méthodes, quelques-unes donnent des résultats satisfaisants du spectre d'absorption de la chlorophylle (figure 4). Dans cette annexe, nous passerons en revue les

méthodes théoriques appliquées sur la molécule de chlorophylle.

### Méthode électron-libre

La méthode *FEMO* tire son origine du modèle du gaz électron-libre unidimensionnelle de Sommerfeld. Développée par Ruedenberg et Scherr [32] pour les molécules comportant des systèmes conjugués, Le Brech et al. [33,34] adaptent leur formalisme pour étudier le spectre d'absorption de la molécule de chlorophylle. Plus tard, Clapp [35] généralise l'approche *FEMO* en introduisant la méthode *courants d'anneaux*. Avant de passer aux résultats, nous allons décrire ces différentes approches qui calculent les énergies de transition à partir des électrons pi.

Dans la méthode *FEMO* de Le Brech et al., on considère le squelette de la chlorophylle formé par les électrons internes des noyaux et les électrons sigma. A partir de l'approximation de résonance de la chlorophylle entre neuf formules, on justifie la délocalisation des électrons pi et leur déplacement le long de la structure conjuguée dans un potentiel créé par le squelette. Ce potentiel est infini partout sauf à l'intérieur d'un rayon infinitésimal le long des branches où circulent 28 électrons pi. Ces approximations permettent alors l'utilisation d'une

orbitale unidimensionnelle pour décrire chaque électron pi. En négligeant le recouvrement des orbitales, on emploie l'équation de Schrödinger donnée par

$$\hat{H} \Psi(x) = \left[ \frac{\hbar^2}{4} \frac{d^2}{dx^2} \right] \Psi(x) = E \Psi(x)$$

Des conditions de branchement sur le squelette et connaissant la solution de l'équation ci-dessus, on calcule aisément les énergies de transition.

Pour généraliser cette approche *FEMO*, Clapp [35] introduit les *courants d'anneaux* impliquant la circulation d'électrons (ou trous) autour de la structure conjuguée de la molécule. Chaque électron pi (ou trou) en mouvement est décrit par une superposition d'orbitales moléculaires correspondant à une orbite. Pour la molécule de chlorophylle *a*, le mouvement d'une seule charge positive (ou trou) autour d'une orbite torsée formée de 19 liens doubles et simples (19-lien) représente l'état fondamental. L'état excité de la bande visible du spectre d'absorption implique neuf électrons inégalement espacés et circulant autour d'une orbite 19-lien non torsée. L'état excité de la bande de Soret (la bande B) se décrit par dix électrons en mouvement sur une orbite 16-lien à distance

inégale l'un de l'autre. L'énergie potentielle électrostatique entre les charges, les contributions magnétique et vibratoire associées au flux de courant et les vibrations du squelette sont négligées. Avec le périmètre de l'orbite égal à la longueur d'onde, on calcule l'énergie de transition par électron.

Par la méthode FEMO, Le Brech et al. obtiennent des résultats comparables aux méthodes LCAO pour les longueurs d'onde de transition du spectre d'absorption. L'accord est particulièrement bon pour les bandes intenses Q<sub>y</sub> et B. Par contre, les populations de liaison concordent peu et les populations atomiques sont en complet désaccord. L'approximation d'équivalence sur tous les atomes et l'utilisation d'une méthode d'intégration numérique pour évaluer ces populations expliquent cet échec.

La méthode courants d'anneaux donne les meilleurs résultats pour les longueurs d'onde maximales du spectre d'absorption de la chlorophylle. Clapp calcule la longueur d'onde de la bande Q et de la bande B à 668 et 427 nanomètres respectivement alors que les valeurs expérimentales sont évaluées à 660.5 et 428.5 nanomètres (figure 4) dans les solvants polaires. L'approximation sur les contributions vibratoire et magnétique explique ce résultat. Clapp fixe la grandeur de la charge totale en mouvement à l'unité

pour l'état fondamental et à une demi pour les états excités du système. Aucun résultat sur les populations de liaison et atomiques n'étant donné par cette méthode, on ne peut évaluer la qualité de la méthode par rapport aux différentes méthodes.

### Combinaison linéaire d'orbitales atomiques

En général, les méthodes basées sur le modèle LCAO sont beaucoup plus difficiles à manipuler et coûteuses en temps que les méthodes FEMO et courants d'anneaux précédentes. Pour réduire ce temps de calcul les méthodes semi-empiriques utilisent des paramètres expérimentaux pour évaluer les intégrales alors que les méthodes *ab initio* attaquent le système en le décomposant en fragments moléculaires. La possibilité d'inclure tous les électrons de valence et internes dans les calculs permet d'effectuer des études sur le comportement relatif d'un ensemble de molécules. Un résumé de la méthode semi-empirique SCMO-PPP-CI "quatre-orbitales" et de la méthode ab initio fragments moléculaires appliquées sur la chlorophylle nous aidera à mieux comprendre les résultats subséquents.

La méthode semi-empirique SCMO-PPP-CI "quatre-orbitales" est la

combinaison du modèle de Gouterman [27] et de la méthode SCMO-PPP-CI. Gouterman introduit le modèle "quatre-orbitales" pour expliquer le spectre d'absorption des porphines. Il interprète les bandes d'absorption comme résultant de l'interaction de configurations des électrons pi. Les deux plus hautes orbitales remplies et presque dégénérées,  $a_{1u}$  et  $a_{2u}$ , interagissent avec les deux plus basses orbitales vides dégénérées,  $e_{gx}$  et  $e_{gy}$ , pour donner les états  $B_x$ ,  $B_y$ ,  $Q_x$  et  $Q_y$ ,

$$B_x = (a_{2u}e_{gx} + a_{1u}e_{gy}) 1/\sqrt{2}$$

$$B_y = (a_{2u}e_{gy} + a_{1u}e_{gx}) 1/\sqrt{2}$$

$$Q_x = (a_{2u}e_{gx} - a_{1u}e_{gy}) 1/\sqrt{2}$$

$$Q_y = (a_{2u}e_{gy} - a_{1u}e_{gx}) 1/\sqrt{2}$$

obtenant ainsi une bande faible Q et une bande intense B. Concomitant à ce modèle, la méthode SCMO-PPP-CI calcule les énergies de transition du spectre d'absorption en se basant sur la théorie des orbitales auto-cohérentes de Pariser, Parr et Pople [22] avec interactions de configurations (plusieurs déterminants de Slater).

L'approche de la méthode ab initio fragments moléculaires introduite par Christoffersen et al. [36,37,38] consiste à décomposer la molécule en

petits fragments moléculaires pour ensuite minimiser l'énergie par rapport à la position et au rayon des fonctions gaussiennes [39,40] décrivant ces fragments. Cette minimisation se fait par une procédure de recherche. Une combinaison linéaire de toutes les fonctions gaussiennes appartenant à tous les fragments décrit les orbitales moléculaires. Les coefficients dans la combinaison indique l'amplitude d'interaction existant entre les différents fragments. Les énergies de transition se calculent par la méthode SCMO-PPP-CI.

A l'aide de la géométrie illustrée à la figure 7, Weiss [18] et Song et al. [41], calculaient, avec les méthode SCMO-PPP "quatre-orbitales" et SCMO-PPP-CI "quatre-orbitales" respectivement et, des paramètres empiriques différents, les énergies de transition et les populations. Pour la partie visible du spectre, leurs résultats étaient en assez bon accord avec les valeurs expérimentales. Pour la bande de Soret, la méthode se révélait insuffisante. Weiss notait aussi qu'à l'état fondamental, l'effet majeur du groupement carbonyle C=O de l'anneau V de la molécule de chlorophylle par rapport aux porphines consistait à déplacer la densité électronique des carbones adjacents de l'anneau IV vers les atomes de l'anneau V. Les autres anneaux pyrroliques ne subissant pas cet effet, les



atomes de l'anneau V devenaient très fortement nucléophiles. Song faisait aussi mention de ce fait mais de façon plus exagérée. Il trouvait en plus, contrairement à Weiss, un déplacement de la densité électronique vers le groupement vinyle et vers l'atome  $\beta$  de l'anneau II devenant ainsi plus nucléophile. Pour sa part, Weiss concluait qu'à l'état excité le groupement vinyle et le groupement carbonyle C=O de l'anneau V jouait un très petit rôle dans l'excitation correspondant à la bande Q.

Spangler et al. [42,43,44] ainsi que Pekte et al. [45,46] adaptait la méthode fragments moléculaires pour l'étude de la chlorophylle. On utilisait la géométrie de la molécule éthyle chlorophyllide a (on remplace la chaîne phytyle par un groupement éthyle). Le remplacement de la chaîne phytyle de la chlorophylle a avec le groupement éthyle était reconnu pour n'avoir aucun effet discernable sur l'atome de magnésium. En comparant les résultats avec ceux obtenus pour le magnésium-porphine et le magnésium, on arrivait à différentes conclusions. En premier lieu, on observait l'isolation de quatre orbitales correspondant à la partie visible du spectre ce qui permettait de décrire les transitions  $^1(\pi,\pi^*)$  des orbitales les plus hautes remplies aux orbitales les plus basses inoccupées. Ces résultats confirmaient ceux de Weiss. En second lieu, on

prédisait la transition  $S_0-S_1$  intense et polarisée dans le plan selon l'axe Y et la transition  $S_0-S_2$  faible, polarisée dans le plan mais non selon l'axe des X comme l'affirmait Weiss. Suite à ces résultats, on vérifiait la dépendance des quatre orbitales sur la coordination de l'atome de magnésium à une molécule d'eau et on observait que la transition  $S_0$  à  $S_1$  ( $\pi,\pi^*$ ) était insensible. L'analyse des populations électroniques du type sigma révélait que l'effet d'introduire le magnésium dans les porphyrines augmentait cette population dans la région N-Mg. Par contre, les différents types de groupements oxygène restaient insensibles; le groupement carbonyle avait une population de type sigma plus élevée que les groupements ester. Pour la population de type pi, les mêmes conclusions étaient tirées. Finalement, on concluait que l'introduction de la molécule d'eau demeurait un effet local impliquant exclusivement l'atome de magnésium. Dans le tableau 4, on compare les résultats des méthodes LCAO et FEMO.

Nous pouvons donc conclure que la méthode SCMO-PPP "quatre orbitales" utilisée par Weiss [18] représente bien le modèle du dimère de chlorophylle a puisque les populations électroniques confirment le rôle de donneur de la chlorophylle a. De plus, le calcul des énergies de

Tableau 4

Comparaison des méthodes LCAO et FEMO dans leur application à la chlorophylle a. Energies d'excitation E, forces oscillateurs f, et angles de polarisation  $\theta$  mesurés à partir de l'axe des X, pour les bandes principales  $Q_x$ ,  $Q_y$ , et B de la chlorophylle a.

Méthode	CI	$E_{Q_y}(\text{cm}^{-1})$	$f_{Q_y}$	$\theta_{Q_y}$	$E_{Q_x}(\text{cm}^{-1})$	$f_{Q_x}$	$\theta_{Q_x}$	$E_B(\text{cm}^{-1})$	$f_B$	$\theta_B$
SCMO-PPP.*	4 orb.	16820	0.26	$91^\circ$	18400	0.051	$24^\circ$	28660	2.59	$85^\circ$
	CI à 150	15990	0.21	$90^\circ$	17760	0.046	$24^\circ$	27440	1.78	$-65^\circ$
	CI à 155	15980	0.22	$91^\circ$	17760	0.052	$27^\circ$	27330	1.92	$-83^\circ$
	Song. calc.	15720	0.33		18210	0.08		24760	3.07	
Frag. Mol.**	CI à 1146	15810	0.60	$84.5^\circ$	17050	0.009	$61^\circ$	38910	0.29	$172^\circ$
FEMO*	—	15170	0.33	$-75^\circ$	18240	0.06	$17^\circ$	23740	0.79	$78^\circ$
Exptl *	—	15100	0.23		17300	—	$\perp$	23260	1.1	$\perp$

\* Tiré de la référence [34]

\*\* Tiré de la référence [46]

transition pour la bande rouge du spectre d'absorption à partir du modèle des quatre orbitales est vérifié par la méthode des fragments moléculaires et approche relativement bien les valeurs expérimentales. L'hypothèse de l'excitation des électrons  $\pi$  seulement dans le dimère de chlorophylle se trouve justifiée ainsi que les différentes approximations faites sur les fonctions d'onde.

## ANNEXE B

### ENERGIES D'INTERACTION VERSUS ANGLES D'EULER

Les angles d'Euler et les énergies d'interaction sont donnés en unité de degré et d'électron-volt respectivement. L'énergie d'interaction se calcule par l'équation (4.23) de la page 92. Le programme Fortran pour obtenir ces résultats est identique à celui utilisé dans le mémoire de Jean-Pierre Drolet [10].

ALPHA = 0.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429
10.	.02496	.02642	.02662	.02557	.02330	.01987	.01539	.01000	.00386	-.00285	-.00992	-.01713
20.	.01274	.01412	.01424	.01311	.01076	.00725	.00269	-.00277	-.00897	-.01572	-.02283	-.03006
30.	.00103	.00229	.00229	.00102	-.00147	-.00511	-.00978	-.01535	-.02165	-.02848	-.03564	-.04291
40.	-.00997	-.00888	-.00907	-.01052	-.01319	-.01701	-.02186	-.02758	-.03401	-.04095	-.04819	-.05551
50.	-.02005	-.01918	-.01960	-.02129	-.02421	-.02826	-.03332	-.03924	-.04584	-.05292	-.06026	-.06764
60.	-.02893	-.02833	-.02904	-.03104	-.03425	-.03859	-.04392	-.05008	-.05689	-.06413	-.07159	-.07904
70.	-.03631	-.03605	-.03711	-.03946	-.04302	-.04770	-.05335	-.05980	-.06684	-.07427	-.08187	-.08939
80.	-.04184	-.04196	-.04343	-.04619	-.05017	-.05524	-.06125	-.06802	-.07533	-.08298	-.09072	-.09832
90.	-.04514	-.04570	-.04763	-.05086	-.05530	-.06081	-.06722	-.07434	-.08195	-.08983	-.09772	-.10540
100.	-.04582	-.04687	-.04930	-.05305	-.05799	-.06397	-.07082	-.07832	-.08625	-.09436	-.10242	-.11017
110.	-.04353	-.04510	-.04808	-.05236	-.05783	-.06431	-.07162	-.07952	-.08777	-.09613	-.10435	-.11216
120.	-.03800	-.04010	-.04363	-.04847	-.05448	-.06147	-.06924	-.07754	-.08612	-.09472	-.10309	-.11096
130.	-.02909	-.03172	-.03579	-.04118	-.04771	-.05520	-.06341	-.07209	-.08098	-.08982	-.09832	-.10624
140.	-.01686	-.01999	-.02456	-.03044	-.03746	-.04540	-.05402	-.06305	-.07223	-.08127	-.08990	-.09786
150.	-.00162	-.00516	-.01017	-.01648	-.02391	-.03224	-.04120	-.05054	-.05995	-.06917	-.07790	-.08588
160.	.01609	.01223	.00689	.00025	-.00750	-.01612	-.02535	-.03491	-.04450	-.05385	-.06266	-.07066
170.	.03547	.03141	.02588	.01903	.01109	.00229	-.00710	-.01680	-.02651	-.03594	-.04480	-.05282

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670
10.	-.02427	-.03112	-.03747	-.04313	-.04792	-.05171	-.05437	-.05582	-.05603	-.05498	-.05271	-.04928
20.	-.03721	-.04405	-.05038	-.05600	-.06075	-.06447	-.06707	-.06845	-.06857	-.06744	-.06508	-.06158
30.	-.05007	-.05690	-.06320	-.06877	-.07344	-.07707	-.07955	-.08081	-.08081	-.07955	-.07706	-.07342
40.	-.06269	-.06951	-.07575	-.08124	-.08581	-.08931	-.09164	-.09273	-.09255	-.09109	-.08842	-.08460
50.	-.07484	-.08163	-.08781	-.09320	-.09762	-.10095	-.10308	-.10395	-.10353	-.10184	-.09892	-.09487
60.	-.08625	-.09301	-.09911	-.10436	-.10860	-.11171	-.11359	-.11419	-.11348	-.11149	-.10827	-.10393
70.	-.09662	-.10333	-.10931	-.11440	-.11842	-.12127	-.12284	-.12311	-.12205	-.11970	-.11613	-.11145
80.	-.10555	-.11219	-.11804	-.12292	-.12669	-.12922	-.13044	-.13032	-.12885	-.12609	-.12211	-.11704
90.	-.11263	-.11918	-.12487	-.12951	-.13297	-.13514	-.13595	-.13539	-.13346	-.13023	-.12579	-.12028
100.	-.11738	-.12383	-.12932	-.13369	-.13681	-.13858	-.13894	-.13789	-.13545	-.13171	-.12677	-.12079
110.	-.11934	-.12567	-.13095	-.13503	-.13777	-.13910	-.13898	-.13741	-.13443	-.13015	-.12468	-.11820
120.	-.11810	-.12429	-.12935	-.13311	-.13547	-.13635	-.13572	-.13362	-.13009	-.12525	-.11924	-.11225
130.	-.11334	-.11939	-.12421	-.12766	-.12963	-.13007	-.12895	-.12631	-.12224	-.11686	-.11033	-.10284
140.	-.10490	-.11081	-.11542	-.11857	-.12019	-.12020	-.11863	-.11551	-.11093	-.10505	-.09803	-.09009
150.	-.09288	-.09867	-.10308	-.10598	-.10728	-.10694	-.10497	-.10143	-.09643	-.09011	-.08268	-.07436
160.	-.07762	-.08332	-.08759	-.09029	-.09135	-.09073	-.08846	-.08460	-.07927	-.07263	-.06488	-.05626
170.	-.05975	-.06539	-.06957	-.07216	-.07307	-.07229	-.06983	-.06577	-.06024	-.05339	-.04545	-.03665

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486
10.	-.04480	-.03941	-.03326	-.02655	-.01949	-.01227	-.00513	.00171	.00806	.01372	.01852	.02230
20.	-.05702	-.05156	-.04536	-.03861	-.03150	-.02427	-.01712	-.01028	-.00395	.00167	.00642	.01014
30.	-.06874	-.06317	-.05688	-.05004	-.04288	-.03561	-.02845	-.02162	-.01533	-.00976	-.00509	-.00146
40.	-.07975	-.07403	-.06760	-.06066	-.05342	-.04610	-.03892	-.03211	-.02586	-.02037	-.01581	-.01230
50.	-.08981	-.08388	-.07728	-.07021	-.06286	-.05548	-.04829	-.04150	-.03531	-.02993	-.02551	-.02218
60.	-.09860	-.09244	-.08563	-.07839	-.07093	-.06348	-.05627	-.04951	-.04342	-.03817	-.03392	-.03081
70.	-.10580	-.09936	-.09231	-.08488	-.07729	-.06976	-.06254	-.05583	-.04984	-.04476	-.04073	-.03789
80.	-.11103	-.10426	-.09695	-.08930	-.08156	-.07396	-.06673	-.06009	-.05424	-.04936	-.04559	-.04306
90.	-.11387	-.10675	-.09914	-.09127	-.08337	-.07569	-.06847	-.06191	-.05622	-.05158	-.04812	-.04595
100.	-.11394	-.10644	-.09851	-.09040	-.08234	-.07459	-.06738	-.06093	-.05544	-.05106	-.04795	-.04618
110.	-.11089	-.10299	-.09474	-.08638	-.07816	-.07035	-.06317	-.05684	-.05156	-.04748	-.04474	-.04341
120.	-.10448	-.09619	-.08760	-.07900	-.07063	-.06276	-.05562	-.04943	-.04438	-.04061	-.03825	-.03737
130.	-.09463	-.08595	-.07705	-.06822	-.05971	-.05179	-.04470	-.03865	-.03383	-.03038	-.02841	-.02797
140.	-.08147	-.07244	-.06326	-.05422	-.04559	-.03763	-.03059	-.02468	-.02007	-.01692	-.01531	-.01529
150.	-.06539	-.05606	-.04664	-.03743	-.02869	-.02071	-.01371	-.00792	-.00351	-.00061	.00069	.00035
160.	-.04703	-.03747	-.02787	-.01852	-.00972	-.00171	.00525	.01095	.01521	.01792	.01898	.01836
170.	-.02726	-.01756	-.00784	.00158	.01044	.01846	.02539	.03103	.03521	.03780	.03871	.03793

ALPHA = 10.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143
10.	.03327	.03349	.03245	.03019	.02677	.02229	.01690	.01076	.00405	-.00303	-.01025	-.01739
20.	.02780	.02798	.02689	.02457	.02109	.01656	.01111	.00491	-.00185	-.00897	-.01623	-.02341
30.	.02269	.02280	.02163	.01923	.01566	.01104	.00550	-.00080	-.00764	-.01484	-.02217	-.02940
40.	.01801	.01803	.01677	.01425	.01056	.00580	.00013	-.00628	-.01325	-.02055	-.02797	-.03529
50.	.01388	.01379	.01239	.00972	.00587	.00096	-.00488	-.01145	-.01857	-.02601	-.03355	-.04096
60.	.01041	.01018	.00861	.00577	.00172	-.00339	-.00942	-.01619	-.02349	-.03109	-.03877	-.04629
70.	.00773	.00733	.00557	.00251	-.00176	-.00710	-.01337	-.02036	-.02786	-.03565	-.04349	-.05114
80.	.00599	.00539	.00341	.00011	-.00441	-.01002	-.01655	-.02379	-.03153	-.03952	-.04754	-.05533
90.	.00535	.00454	.00231	-.00127	-.00608	-.01198	-.01879	-.02630	-.03429	-.04251	-.05072	-.05866
100.	.00597	.00492	.00242	-.00145	-.00657	-.01278	-.01989	-.02770	-.03595	-.04441	-.05281	-.06091
110.	.00799	.00667	.00389	-.00028	-.00572	-.01225	-.01968	-.02779	-.03632	-.04501	-.05361	-.06186
120.	.01149	.00991	.00684	.00236	-.00340	-.01026	-.01800	-.02640	-.03520	-.04413	-.05293	-.06131
130.	.01650	.01467	.01132	.00653	.00047	-.00670	-.01474	-.02343	-.03248	-.04164	-.05061	-.05913
140.	.02296	.02090	.01223	.00588	-.00157	-.00989	-.01883	-.02811	-.03746	-.04660	-.05523	-.06352
150.	.03068	.02843	.02460	.01931	.01272	.00503	-.00351	-.01267	-.02215	-.03167	-.04093	-.04967
160.	.03938	.03698	.03299	.02752	.02076	.01289	.00417	-.00514	-.01477	-.02441	-.03378	-.04259
170.	.04867	.04617	.04208	.03652	.02964	.02167	.01284	.00343	-.00629	-.01601	-.02544	-.03429
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225
10.	-.02425	-.03062	-.03629	-.04110	-.04490	-.04757	-.04904	-.04926	-.04822	-.04595	-.04253	-.03806
20.	-.03030	-.03667	-.04235	-.04715	-.05093	-.05358	-.05501	-.05519	-.05410	-.05179	-.04831	-.04377
30.	-.03633	-.04273	-.04841	-.05321	-.05697	-.05958	-.06096	-.06107	-.05991	-.05751	-.05394	-.04931
40.	-.04227	-.04871	-.05440	-.05919	-.06292	-.06548	-.06679	-.06681	-.06554	-.06303	-.05933	-.05458
50.	-.04801	-.05449	-.06021	-.06498	-.06867	-.07116	-.07238	-.07229	-.07089	-.06822	-.06437	-.05945
60.	-.05343	-.05996	-.06569	-.07045	-.07409	-.07650	-.07760	-.07737	-.07580	-.07296	-.06891	-.06380
70.	-.05837	-.06496	-.07071	-.07544	-.07901	-.08131	-.08228	-.08188	-.08012	-.07706	-.07279	-.06745
80.	-.06266	-.06931	-.07506	-.07976	-.08325	-.08543	-.08624	-.08564	-.08366	-.08036	-.07583	-.07022
90.	-.06609	-.07279	-.07855	-.08320	-.08659	-.08863	-.08926	-.08844	-.08621	-.08264	-.07783	-.07193
100.	-.06844	-.07519	-.08094	-.08554	-.08882	-.09070	-.09112	-.09006	-.08757	-.08370	-.07858	-.07237
110.	-.06949	-.07628	-.08203	-.08655	-.08971	-.09142	-.09162	-.09031	-.08753	-.08335	-.07792	-.07138
120.	-.06904	-.07587	-.08159	-.08604	-.08907	-.09060	-.09058	-.08901	-.08594	-.08145	-.07569	-.06884
130.	-.06694	-.07379	-.07949	-.08386	-.08677	-.08812	-.08788	-.08606	-.08270	-.07792	-.07185	-.06468
140.	-.06311	-.06999	-.07567	-.07996	-.08274	-.08393	-.08349	-.08143	-.07782	-.07276	-.06641	-.05897
150.	-.05760	-.06450	-.07015	-.07438	-.07706	-.07811	-.07749	-.07524	-.07141	-.06612	-.05953	-.05185
160.	-.05057	-.05748	-.06311	-.06729	-.06989	-.07084	-.07010	-.06769	-.06370	-.05823	-.05147	-.04360
170.	-.04230	-.04923	-.05485	-.05900	-.06156	-.06245	-.06163	-.05914	-.05505	-.04948	-.04260	-.03463
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754
10.	-.03267	-.02652	-.01981	-.01274	-.00552	.00163	.00849	.01485	.02052	.02533	.02913	.03180
20.	-.03833	-.03213	-.02536	-.01824	-.01098	.00380	.010308	.01696	.02153	.02593	.02913	.03137
30.	-.04377	-.03748	-.03063	-.02344	-.01611	-.00887	-.00195	.00445	.01014	.01493	.01869	.02130
40.	-.04891	-.04249	-.03553	-.02822	-.02080	-.01349	-.00651	-.00007	.00563	.01042	.01414	.01670
50.	-.05362	-.04704	-.03993	-.03249	-.02495	-.01754	-.01049	-.00401	.00171	.00648	.01017	.01266
60.	-.05777	-.05100	-.04370	-.03610	-.02842	-.02090	-.01376	-.00723	.00149	.00626	.00990	.01231
70.	-.06118	-.05419	-.04669	-.03890	-.03106	-.02341	-.01618	-.00959	-.00384	.00089	.00446	.00676
80.	-.06370	-.05646	-.04872	-.04072	-.03271	-.02491	-.01759	-.01094	-.00518	-.00049	.00300	.00518
90.	-.06512	-.05760	-.04961	-.04139	-.03318	-.02525	-.01781	-.01112	-.00535	-.00070	.00269	.00473
100.	-.06526	-.05745	-.04919	-.04074	-.03233	-.02424	-.01671	-.00996	-.00420	.00039	.00367	.00555
110.	-.06395	-.05585	-.04732	-.03862	-.03002	-.02178	-.01415	-.00736	-.00161	.00291	.00608	.00778
120.	-.06109	-.05269	-.04389	-.03496	-.02617	-.01778	-.01006	-.00323	.00249	.00694	.00998	.01151
130.	-.05664	-.04795	-.03890	-.02975	-.02077	-.01225	-.00445	.00241	.00811	.01248	.01539	.01674
140.	-.05065	-.04171	-.03242	-.02307	-.01394	-.00530	.00258	.00946	.01513	.01943	.02221	.02340
150.	-.04330	-.03414	-.02466	-.01515	-.00588	.00286	.01079	.01769	.02334	.02757	.03025	.03130
160.	-.03488	-.02557	-.01594	-.00630	.00307	.01188	.01986	.02677	.03240	.03658	.03918	.04013
170.	-.02581	-.01639	-.00668	.00304	.01247	.02133	.02934	.03626	.04189	.04604	.04860	.04948

ALPHA = 20.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828
10.	.04051	.03949	.03723	.03382	.02936	.02397	.01783	.01113	.00405	-.00317	-.01032	-.01719
20.	.04196	.04093	.03866	.03522	.03073	.02531	.01913	.01238	.00526	-.00201	-.00921	-.01611
30.	.04360	.04256	.04027	.03680	.03226	.02679	.02055	.01373	.00654	-.00081	-.00808	-.01506
40.	.04540	.04435	.04204	.03853	.03393	.02839	.02206	.01515	.00786	.00041	-.00696	-.01404
50.	.04735	.04629	.04395	.04039	.03572	.03009	.02366	.01663	.00922	.00164	-.00587	-.01308
60.	.04939	.04834	.04597	.04235	.03760	.03187	.02531	.01815	.01058	.00285	-.00482	-.01218
70.	.05150	.05045	.04804	.04437	.03953	.03367	.02698	.01966	.01192	.00401	-.00383	-.01138
80.	.05362	.05257	.05013	.04639	.04145	.03547	.02863	.02113	.01321	.00510	-.00295	-.01069
90.	.05567	.05463	.05216	.04836	.04332	.03720	.03020	.02252	.01439	.00607	-.00219	-.01015
100.	.05759	.05656	.05407	.05019	.04505	.03880	.03163	.02376	.01543	.00688	-.00161	-.00980
110.	.05928	.05826	.05575	.05182	.04658	.04019	.03286	.02479	.01625	.00748	-.00124	-.00966
120.	.06066	.05966	.05714	.05314	.04781	.04130	.03380	.02555	.01680	.00782	-.00114	-.00978
130.	.06163	.06067	.05813	.05409	.04867	.04204	.03440	.02598	.01704	.00785	-.00132	-.01018
140.	.06214	.06121	.05866	.05458	.04910	.04236	.03460	.02602	.01691	.00753	-.00183	-.01088
150.	.06212	.06122	.05868	.05457	.04903	.04222	.03434	.02565	.01639	.00686	-.00266	-.01188
160.	.06156	.06069	.05815	.05403	.04845	.04158	.03363	.02485	.01549	.00584	-.00380	-.01315
170.	.06047	.05962	.05709	.05297	.04737	.04047	.03248	.02364	.01422	.00450	-.00522	-.01465

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688
10.	-.02356	-.02925	-.03407	-.03788	-.04057	-.04205	-.04228	-.04126	-.03900	-.03559	-.03113	-.02574
20.	-.02253	-.02824	-.03309	-.03693	-.03963	-.04112	-.04135	-.04032	-.03805	-.03461	-.03012	-.02470
30.	-.02154	-.02732	-.03222	-.03609	-.03883	-.04034	-.04057	-.03953	-.03724	-.03378	-.02924	-.02376
40.	-.02062	-.02648	-.03146	-.03540	-.03818	-.03971	-.03996	-.03891	-.03660	-.03309	-.02849	-.02295
50.	-.01977	-.02575	-.03082	-.03484	-.03768	-.03926	-.03953	-.03847	-.03613	-.03257	-.02791	-.02227
60.	-.01902	-.02514	-.03033	-.03445	-.03736	-.03899	-.03928	-.03823	-.03585	-.03224	-.02749	-.02175
70.	-.01839	-.02466	-.02999	-.03422	-.03723	-.03882	-.03924	-.03819	-.03578	-.03211	-.02727	-.02141
80.	-.01789	-.02434	-.02983	-.03419	-.03731	-.03907	-.03943	-.03838	-.03594	-.03220	-.02726	-.02128
90.	-.01756	-.02420	-.02986	-.03437	-.03760	-.03944	-.03985	-.03881	-.03634	-.03253	-.02750	-.02138
100.	-.01742	-.02426	-.03011	-.03478	-.03813	-.04007	-.04053	-.03949	-.03700	-.03313	-.02799	-.02174
110.	-.01751	-.02456	-.03059	-.03543	-.03891	-.04094	-.04146	-.04045	-.03793	-.03400	-.02876	-.02237
120.	-.01785	-.02511	-.03133	-.03633	-.03994	-.04208	-.04266	-.04166	-.03913	-.03514	-.02981	-.02330
130.	-.01846	-.02592	-.03232	-.03748	-.04123	-.04345	-.04410	-.04313	-.04059	-.03655	-.03114	-.02451
140.	-.01935	-.02699	-.03356	-.03886	-.04273	-.04505	-.04576	-.04483	-.04228	-.03820	-.03271	-.02598
150.	-.02051	-.02831	-.03502	-.04044	-.04442	-.04683	-.04759	-.04669	-.04414	-.04004	-.03450	-.02768
160.	-.02191	-.02982	-.03665	-.04217	-.04624	-.04871	-.04952	-.04865	-.04611	-.04199	-.03641	-.02954
170.	-.02349	-.03148	-.03838	-.04398	-.04810	-.05062	-.05148	-.05062	-.04810	-.04398	-.03838	-.03148

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903
10.	-.01960	-.01290	-.00582	.00140	.00855	.01542	.02179	.02748	.03230	.03611	.03880	.04028
20.	-.01852	-.01177	-.00465	.00262	.00981	.01672	.02313	.02885	.03370	.03754	.04024	.04173
30.	-.01752	-.01070	-.00351	.00383	.01110	.01808	.02456	.03034	.03524	.03912	.04185	.04336
40.	-.01662	-.00971	-.00242	.00503	.01240	.01948	.02606	.03192	.03690	.04084	.04362	.04515
50.	-.01584	-.00881	-.00140	.00618	.01369	.02090	.02759	.03357	.03864	.04266	.04550	.04708
60.	-.01520	-.00803	-.00047	.00726	.01493	.02230	.02914	.03525	.04044	.04456	.04748	.04910
70.	-.01472	-.00740	.00034	.00825	.01609	.02364	.03065	.03692	.04225	.04648	.04949	.05118
80.	-.01444	-.00694	.00098	.00909	.01714	.02488	.03208	.03853	.04402	.04838	.05150	.05326
90.	-.01438	-.00670	.00143	.00975	.01801	.02597	.03338	.04002	.04568	.05019	.05342	.05527
100.	-.01457	-.00670	.00164	.01018	.01867	.02686	.03449	.04133	.04717	.05184	.05519	.05713
110.	-.01504	-.00698	.00157	.01034	.01906	.02748	.03533	.04238	.04841	.05324	.05673	.05876
120.	-.01580	-.00755	.00120	.01018	.01914	.02778	.03585	.04311	.04933	.05433	.05794	.06008
130.	-.01687	-.00845	.00050	.00969	.01886	.02772	.03600	.04346	.04986	.05501	.05876	.06099
140.	-.01821	-.00964	-.00053	.00885	.01821	.02726	.03574	.04337	.04994	.05524	.05911	.06144
150.	-.01981	-.01111	-.00186	.00767	.01719	.02641	.03505	.04284	.04955	.05498	.05895	.06136
160.	-.02160	-.01281	-.00345	.00620	.01584	.02519	.03393	.04186	.04868	.05421	.05827	.06075
170.	-.02349	-.01465	-.00522	.00450	.01422	.02364	.03248	.04047	.04737	.05297	.05709	.05962



ALPHA = 30.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464
10.	.04646	.04422	.04082	.03637	.03099	.02486	.01816	.01109	.00387	-.00328	-.01015	-.01653
20.	.05479	.05257	.04919	.04475	.03937	.03323	.02651	.01941	.01215	.00496	-.00196	-.00839
30.	.06313	.06096	.05762	.05319	.04782	.04166	.03491	.02777	.02046	.01319	.00619	-.00032
40.	.07136	.06927	.06598	.06159	.05622	.05005	.04327	.03607	.02867	.02131	.01420	.00757
50.	.07932	.07734	.07413	.06978	.06444	.05826	.05143	.04416	.03667	.02919	.02194	.01515
60.	.08684	.08499	.08188	.07761	.07230	.06611	.05924	.05189	.04428	.03666	.02924	.02225
70.	.09369	.09201	.08903	.08484	.07958	.07340	.06648	.05904	.05131	.04352	.03590	.02870
80.	.09960	.09812	.09531	.09124	.08604	.07987	.07291	.06539	.05752	.04954	.04171	.03425
90.	.10430	.10305	.10043	.09650	.09138	.08524	.07825	.07064	.06263	.05446	.04638	.03865
100.	.10746	.10648	.10408	.10031	.09530	.08920	.08219	.07449	.06633	.05796	.04964	.04161
110.	.10879	.10810	.10594	.10236	.09747	.09143	.08441	.07663	.06833	.05976	.05117	.04284
120.	.10801	.10763	.10572	.10234	.09759	.09162	.08460	.07676	.06832	.05955	.05071	.04207
130.	.10494	.10487	.10322	.10004	.09544	.08954	.08254	.07464	.06608	.05712	.04804	.03911
140.	.09949	.09971	.09831	.09533	.09087	.08506	.07808	.07013	.06147	.05235	.04305	.03385
150.	.09175	.09222	.09104	.08824	.08391	.07818	.07122	.06325	.05450	.04524	.03576	.02634
160.	.08195	.08263	.08162	.07897	.07475	.06908	.06215	.05415	.04534	.03598	.02636	.01676
170.	.07051	.07133	.07045	.06789	.06374	.05813	.05121	.04321	.03436	.02494	.01523	.00552
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076
10.	-.02222	-.02705	-.03087	-.03357	-.03507	-.03531	-.03430	-.03206	-.02866	-.02421	-.01884	-.01271
20.	-.01413	-.01902	-.02289	-.02564	-.02718	-.02747	-.02649	-.02428	-.02090	-.01645	-.01107	-.00493
30.	-.00616	-.01113	-.01510	-.01794	-.01956	-.01992	-.01901	-.01684	-.01350	-.00907	-.00370	.00246
40.	.00160	-.00351	-.00761	-.01058	-.01232	-.01279	-.01197	-.00988	-.00659	-.00220	.00317	.00933
50.	.00901	.00373	-.00055	-.00369	-.00560	-.00621	-.00552	-.00353	-.00032	.00403	.00937	.01555
60.	.01591	.01041	.00592	.00257	.00046	-.00034	.00019	.00204	.00515	.00943	.01474	.02092
70.	.02211	.01636	.01161	.00800	.00565	.00462	.00496	.00664	.00962	.01380	.01907	.02525
80.	.02739	.02134	.01629	.01239	.00975	.00846	.00856	.01004	.01286	.01693	.02213	.02830
90.	.03148	.02511	.01973	.01549	.01253	.01094	.01076	.01200	.01463	.01856	.02367	.02982
100.	.03412	.02739	.02164	.01704	.01372	.01179	.01131	.01229	.01469	.01846	.02347	.02957
110.	.03501	.02791	.02178	.01679	.01309	.01080	.00998	.01067	.01284	.01642	.02130	.02735
120.	.03390	.02643	.01991	.01452	.01043	.00776	.00660	.00698	.00889	.01228	.01702	.02300
130.	.03061	.02278	.01587	.01009	.00561	.00258	.00107	.00115	.00280	.00597	.01058	.01647
140.	.02504	.01688	.00962	.00347	-.00136	-.00475	-.00658	-.00679	-.00539	-.00242	.00205	.00786
150.	.01726	.00881	.00124	-.00522	-.01037	-.01406	-.01617	-.01665	-.01547	-.01267	-.00834	-.00261
160.	.00749	-.00118	-.00899	-.01570	-.02110	-.02503	-.02737	-.02805	-.02705	-.02439	-.02017	-.01450
170.	-.00388	-.01270	-.02066	-.02753	-.03310	-.03718	-.03967	-.04049	-.03961	-.03705	-.03290	-.02729
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927
10.	-.00600	.00106	.00829	.01544	.02231	.02869	.03438	.03920	.04303	.04573	.04722	.04747
20.	.00179	.00889	.01614	.02334	.03026	.03668	.04243	.04731	.05119	.05394	.05548	.05576
30.	.00921	.01635	.02366	.03093	.03793	.04444	.05028	.05525	.05922	.06206	.06368	.06404
40.	.01612	.02332	.03071	.03808	.04518	.05182	.05778	.06290	.06700	.06997	.07171	.07218
50.	.02238	.02965	.03714	.04462	.05187	.05866	.06480	.07008	.07436	.07750	.07941	.08002
60.	.02780	.03514	.04275	.05038	.05780	.06478	.07112	.07662	.08111	.08447	.08657	.08737
70.	.03216	.03960	.04733	.05512	.06274	.06995	.07653	.08228	.08704	.09064	.09300	.09402
80.	.03525	.04277	.05064	.05862	.06645	.07391	.08077	.08682	.09187	.09577	.09841	.09970
90.	.03680	.04442	.05243	.06060	.06867	.07641	.08357	.08994	.09533	.09957	.10253	.10412
100.	.03658	.04428	.05244	.06081	.06913	.07716	.08465	.09138	.09713	.10173	.10505	.10698
110.	.03437	.04214	.05044	.05902	.06760	.07594	.08377	.09086	.09699	.10199	.10568	.10797
120.	.03001	.03786	.04629	.05507	.06390	.07254	.08072	.08818	.09471	.10010	.10419	.10685
130.	.02348	.03138	.03994	.04889	.05797	.06690	.07541	.08324	.09015	.09593	.10040	.10344
140.	.01484	.02278	.03145	.04057	.04987	.05906	.06788	.07604	.08330	.08944	.09428	.09767
150.	.00435	.01233	.02108	.03034	.03982	.04924	.05831	.06676	.07433	.08079	.08594	.08963
160.	-.00757	.00042	.00924	.01859	.02822	.03781	.04709	.05576	.06357	.07028	.07568	.07961
170.	-.02037	-.01237	-.00352	.00590	.01561	.02532	.03472	.04354	.05150	.05837	.06394	.06802

ALPHA = 40.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032
10.	.05093	.04755	.04311	.03774	.03163	.02493	.01787	.01066	.00351	-.00336	-.00973	-.01543
20.	.06589	.06256	.05817	.05285	.04675	.04007	.03301	.02579	.01861	.01170	.00528	-.00047
30.	.08068	.07746	.07316	.06791	.06187	.05521	.04816	.04091	.03370	.02673	.02022	.01437
40.	.09510	.09203	.08786	.08272	.07675	.07014	.06310	.05583	.04856	.04151	.03488	.02889
50.	.10885	.10599	.10200	.09701	.09115	.08461	.07759	.07030	.06296	.05580	.04903	.04286
60.	.12161	.11903	.11527	.11046	.10475	.09830	.09132	.08401	.07660	.06930	.06236	.05597
70.	.13300	.13074	.12727	.12271	.11718	.11085	.10392	.09660	.08910	.08167	.07451	.06786
80.	.14254	.14068	.13756	.13329	.12798	.12181	.11495	.10763	.10005	.09245	.08507	.07812
90.	.14975	.14834	.14563	.14169	.13666	.13067	.12391	.11660	.10894	.10117	.09353	.08626
100.	.15408	.15318	.15093	.14738	.14265	.13688	.13025	.12296	.11522	.10728	.09937	.09174
110.	.15502	.15468	.15292	.14980	.14541	.13989	.13341	.12615	.11834	.11022	.10204	.09404
120.	.15213	.15236	.15113	.14846	.14444	.13918	.13286	.12565	.11779	.10950	.10104	.09267
130.	.14511	.14592	.14521	.14300	.13934	.13436	.12821	.12106	.11315	.10470	.09599	.08726
140.	.13388	.13524	.13503	.13324	.12994	.12523	.11924	.11216	.10421	.09562	.08667	.07761
150.	.11865	.12049	.12071	.11930	.11631	.11183	.10600	.09898	.09101	.08231	.07315	.06381
160.	.09992	.10213	.10269	.10159	.09885	.09456	.08885	.08189	.07389	.06511	.05580	.04624
170.	.07850	.08096	.08174	.08084	.07826	.07410	.06847	.06155	.05355	.04471	.03530	.02561

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406
10.	-.02026	-.02409	-.02680	-.02831	-.02856	-.02757	-.02534	-.02196	-.01751	-.01215	-.00603	.00066
20.	-.00537	-.00927	-.01206	-.01364	-.01397	-.01304	-.01088	-.00756	-.00317	.00216	.00825	.01493
30.	.00936	.00533	.00242	.00070	.00024	.00104	.00308	.00630	.01060	.01586	.02190	.02855
40.	.02372	.01952	.01641	.01451	.01385	.01447	.01633	.01940	.02357	.02871	.03468	.04129
50.	.03747	.03304	.02969	.02752	.02661	.02698	.02862	.03147	.03546	.04046	.04632	.05286
60.	.05032	.04560	.04194	.03946	.03823	.03828	.03962	.04221	.04596	.05077	.05649	.06293
70.	.06191	.05685	.05282	.04995	.04832	.04890	.05124	.05470	.05927	.06480	.07113	.07701
80.	.07182	.06635	.06189	.05857	.05649	.05572	.05627	.05813	.06125	.06553	.07083	.07701
90.	.07956	.07365	.06870	.06487	.06227	.06098	.06104	.06244	.06515	.06909	.07413	.08011
100.	.08462	.07822	.07274	.06834	.06516	.06300	.06281	.06370	.06596	.06950	.07423	.08000
110.	.08647	.07955	.07350	.06831	.06471	.06223	.06115	.06149	.06324	.06636	.07075	.07627
120.	.08464	.07720	.07057	.06495	.06051	.05740	.05570	.05546	.05669	.05936	.06338	.06864
130.	.07878	.07083	.06362	.05739	.05233	.04858	.04626	.04545	.04616	.04837	.05203	.05701
140.	.06873	.06029	.05256	.04576	.04010	.03576	.03286	.03151	.03172	.03351	.03681	.04152
150.	.05458	.04573	.03753	.03024	.02407	.01921	.01581	.01397	.01375	.01516	.01815	.02263
160.	.03673	.02756	.01901	.01133	.00476	-.00051	-.00430	-.00652	-.00708	-.00597	-.00323	.00106
170.	.01592	.00655	-.00224	-.01017	-.01700	-.02253	-.02659	-.02904	-.02983	-.02892	-.02635	-.02218

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825
10.	.00772	.01493	.02208	.02895	.03533	.04102	.04585	.04968	.05239	.05390	.05416	.05316
20.	.02199	.02922	.03639	.04330	.04972	.05547	.06038	.06428	.06706	.06864	.06898	.06805
30.	.03561	.04285	.05007	.05704	.06355	.06939	.07441	.07843	.08135	.08306	.08353	.08273
40.	.04833	.05560	.06287	.06992	.07655	.08254	.08771	.09191	.09502	.09692	.09758	.09697
50.	.05988	.06717	.07451	.08167	.08844	.09461	.09999	.10443	.10778	.10994	.11085	.11049
60.	.06992	.07723	.08464	.09193	.09888	.10527	.11091	.11564	.11929	.12178	.12301	.12295
70.	.07806	.08538	.09287	.10031	.10746	.11411	.12006	.12513	.12916	.13203	.13365	.13398
80.	.08386	.09119	.09876	.10636	.11374	.12069	.12700	.13246	.13692	.14024	.14232	.14309
90.	.08687	.09419	.10185	.10961	.11725	.12453	.13122	.13714	.14208	.14591	.14852	.14981
100.	.08663	.09393	.10166	.10961	.11751	.12514	.13227	.13867	.14415	.14854	.15172	.15358
110.	.08276	.09001	.09782	.10594	.11412	.12212	.12969	.13661	.14266	.14766	.15145	.15393
120.	.07496	.08217	.09003	.09832	.10678	.11515	.12318	.13062	.13725	.14287	.14731	.15042
130.	.06316	.07030	.07822	.08666	.09538	.10411	.11258	.12054	.12775	.13398	.13904	.14279
140.	.04751	.05459	.06254	.07112	.08008	.08914	.09802	.10646	.11419	.12099	.12665	.13099
150.	.02846	.03548	.04345	.05215	.06131	.07065	.07988	.08873	.09693	.10422	.11039	.11525
160.	.00677	.01373	.02172	.03051	.03982	.04937	.05888	.06805	.07661	.08429	.09086	.09612
170.	-.01655	-.00963	-.00163	.00721	.01662	.02631	.03599	.04537	.05416	.06209	.06892	.07445

ALPHA = 50.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513
10.	.05379	.04937	.04402	.03791	.03123	.02418	.01698	.00984	.00298	-.00339	-.00908	-.01392
20.	.07493	.07059	.06532	.05928	.05265	.04564	.03846	.03132	.02444	.01804	.01230	.00740
30.	.09573	.09155	.08642	.08050	.07397	.06703	.05988	.05275	.04585	.03939	.03357	.02856
40.	.11589	.11194	.10702	.10128	.09489	.08805	.08096	.07384	.06691	.06038	.05444	.04928
50.	.13502	.13138	.12674	.12123	.11504	.10834	.10133	.09425	.08728	.08066	.07457	.06922
60.	.15265	.14940	.14512	.13992	.13398	.12746	.12058	.11353	.10653	.09980	.09354	.08793
70.	.16824	.16547	.16162	.15681	.15118	.14490	.13817	.13118	.12415	.11729	.11082	.10493
80.	.18113	.17894	.17562	.17127	.16601	.16002	.15347	.14657	.13951	.13253	.12582	.11959
90.	.19064	.18911	.18639	.18257	.17777	.17211	.16579	.15899	.15192	.14479	.13782	.13123
100.	.19602	.19523	.19319	.18997	.18567	.18041	.17435	.16768	.16060	.15333	.14608	.13908
110.	.19655	.19657	.19527	.19271	.18895	.18412	.17836	.17184	.16477	.15735	.14982	.14240
120.	.19165	.19250	.19197	.19010	.18692	.18254	.17710	.17075	.16370	.15614	.14832	.14048
130.	.18091	.18259	.18284	.18165	.17906	.17514	.17002	.16385	.15682	.14914	.14105	.13279
140.	.16427	.16673	.16770	.16716	.16512	.16164	.15683	.15083	.14383	.13605	.12770	.11906
150.	.14202	.14516	.14677	.14680	.14524	.14215	.13762	.13178	.12481	.11693	.10838	.09941
160.	.11493	.11861	.12072	.12119	.12002	.11723	.11292	.10721	.10027	.09233	.08361	.07438
170.	.08418	.08821	.09064	.09140	.09048	.08789	.08372	.07810	.07118	.06320	.05438	.04499

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701
10.	-.01775	-.02047	-.02198	-.02224	-.02126	-.01904	-.01567	-.01124	-.00589	.00021	.00689	.01394
20.	.00349	.00069	-.00092	-.00128	-.00040	.00172	.00499	.00933	.01460	.02064	.02727	.03428
30.	.02432	.02157	.01980	.01926	.01997	.02191	.02502	.02920	.03433	.04025	.04678	.05372
40.	.04506	.04189	.03988	.03910	.03955	.04123	.04409	.04804	.05296	.05871	.06510	.07194
50.	.06474	.06130	.05898	.05786	.05797	.05931	.06184	.06548	.07012	.07563	.08182	.08852
60.	.08316	.07936	.07665	.07511	.07479	.07570	.07781	.08106	.08535	.09054	.09649	.10300
70.	.09979	.09557	.09239	.09034	.08950	.08989	.09149	.09425	.09810	.10291	.10854	.11482
80.	.11403	.10932	.10559	.10295	.10150	.10126	.10225	.10445	.10777	.11212	.11738	.12337
90.	.12520	.11993	.11557	.11227	.11011	.10916	.10945	.11098	.11370	.11752	.12233	.12798
100.	.13254	.12666	.12162	.11757	.11463	.11289	.11241	.11319	.11523	.11845	.12275	.12802
110.	.13532	.12879	.12301	.11816	.11438	.11179	.11047	.11046	.11175	.11432	.11807	.12290
120.	.13284	.12565	.11911	.11344	.10879	.10532	.10313	.10228	.10280	.10468	.10786	.11223
130.	.12461	.11676	.10948	.10299	.09749	.09315	.09009	.08841	.08816	.08935	.09195	.09586
140.	.11038	.10192	.09395	.08670	.08040	.07524	.07137	.06891	.06793	.06848	.07052	.07400
150.	.09030	.08132	.07274	.06484	.05784	.05196	.04738	.04424	.04263	.04260	.04416	.04725
160.	.06493	.05555	.04650	.03808	.03054	.02410	.01897	.01529	.01318	.01271	.01388	.01667
170.	.03533	.02568	.01633	.00758	-.00031	-.00711	-.01261	-.01663	-.01906	-.01983	-.01890	-.01631

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601
10.	.02114	.02829	.03515	.04152	.04721	.05204	.05588	.05859	.06010	.06037	.05938	.05717
20.	.04146	.04860	.05548	.06189	.06762	.07252	.07643	.07923	.08084	.08121	.08032	.07820
30.	.06087	.06800	.07490	.08136	.08718	.09219	.09623	.09918	.10095	.10149	.10078	.09884
40.	.07903	.08614	.09307	.09960	.10554	.11070	.11493	.11809	.12010	.12089	.12044	.11875
50.	.09552	.10261	.10958	.11620	.12228	.12764	.13211	.13556	.13788	.13900	.13889	.13755
60.	.10989	.11694	.12393	.13066	.13693	.14253	.14731	.15111	.15382	.15535	.15567	.15476
70.	.12156	.12855	.13557	.14243	.14890	.15480	.15993	.16415	.16734	.16938	.17022	.16984
80.	.12992	.13682	.14388	.15086	.15757	.16380	.16935	.17407	.17780	.18043	.18189	.18213
90.	.13430	.14110	.14817	.15530	.16227	.16887	.17490	.18017	.18452	.18783	.18999	.19094
100.	.13407	.14074	.14782	.15509	.16234	.16934	.17588	.18176	.18680	.19086	.19380	.19553
110.	.12866	.13518	.14225	.14967	.15720	.16462	.17170	.17823	.18401	.18887	.19264	.19523
120.	.11768	.12402	.13108	.13863	.14645	.15430	.16194	.16913	.17567	.18134	.18598	.18946
130.	.10098	.10715	.11418	.12186	.12996	.13822	.14640	.15424	.16152	.16801	.17351	.17785
140.	.07881	.08480	.09180	.09959	.10793	.11657	.12525	.13371	.14168	.14893	.15523	.16039
150.	.05178	.05762	.06458	.07246	.08102	.08999	.09910	.10808	.11666	.12456	.13156	.13744
160.	.02098	.02669	.03363	.04157	.05029	.05952	.06896	.07835	.08739	.09582	.10336	.10980
170.	-.01214	-.00652	.00039	.00838	.01720	.02659	.03625	.04590	.05524	.06400	.07189	.07869

ALPHA = 60.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894
10.	.05496	.04963	.04353	.03687	.02983	.02264	.01551	.00866	.00229	-.00339	-.00822	-.01205
20.	.08163	.07641	.07043	.06385	.05689	.04976	.04267	.03583	.02947	.02376	.01888	.01498
30.	.10782	.10280	.09700	.09060	.08377	.07675	.06972	.06292	.05655	.05080	.04584	.04183
40.	.13312	.12840	.12287	.11671	.11009	.10322	.09630	.08955	.08318	.07736	.07229	.06812
50.	.15704	.15273	.14757	.14173	.13538	.12872	.12195	.11528	.10890	.10302	.09780	.09342
60.	.17902	.17520	.17051	.16509	.15909	.15271	.14613	.13956	.13319	.12722	.12183	.11718
70.	.19834	.19514	.19103	.18612	.18056	.17451	.16818	.16173	.15538	.14932	.14372	.13877
80.	.21420	.21175	.20832	.20402	.19898	.19335	.18730	.18103	.17471	.16854	.16271	.15740
90.	.22574	.22413	.22149	.21790	.21346	.20832	.20262	.19654	.19027	.18400	.17791	.17219
100.	.23201	.23135	.22959	.22680	.22304	.21845	.21315	.20730	.20110	.19471	.18835	.18220
110.	.23214	.23250	.23170	.22977	.22676	.22276	.21790	.21232	.20620	.19971	.19305	.18644
120.	.22538	.22681	.22701	.22598	.22375	.22038	.21598	.21069	.20465	.19806	.19112	.18404
130.	.21127	.21376	.21495	.21482	.21337	.21063	.20670	.20169	.19576	.18908	.18186	.17432
140.	.18971	.19320	.19533	.19605	.19533	.19319	.18970	.18497	.17914	.17238	.16491	.15694
150.	.16114	.16549	.16844	.16990	.16982	.16821	.16512	.16063	.15489	.14807	.14038	.13205
160.	.12653	.13156	.13515	.13719	.13761	.13642	.13363	.12934	.12368	.11681	.10895	.10034
170.	.08739	.09286	.09686	.09928	.10003	.09910	.09651	.09235	.08674	.07984	.07188	.06309
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020
10.	-.01477	-.01628	-.01655	-.01557	-.01336	-.01000	-.00558	-.00025	.00584	.01251	.01955	.02674
20.	.01218	.01057	.01019	.01105	.01313	.01637	.02066	.02588	.03187	.03844	.04540	.05253
30.	.03889	.03710	.03653	.03718	.03905	.04206	.04614	.05116	.05696	.06336	.07019	.07721
40.	.06497	.06294	.06209	.06244	.06399	.06669	.07046	.07517	.08070	.08687	.09349	.10036
50.	.09000	.08764	.08642	.08638	.08751	.08979	.09314	.09745	.10261	.10845	.11480	.12146
60.	.11342	.11066	.10898	.10844	.10905	.11079	.11360	.11741	.12210	.12753	.13353	.13991
70.	.13460	.13135	.12912	.12796	.12793	.12902	.13119	.13438	.13849	.14341	.14897	.15501
80.	.15276	.14894	.14605	.14418	.14340	.14371	.14512	.14757	.15100	.15530	.16034	.16597
90.	.16702	.16255	.15892	.15624	.15459	.15402	.15454	.15615	.15879	.16238	.16682	.17196
100.	.17644	.17126	.16681	.16322	.16061	.15905	.15860	.15926	.16101	.16381	.16756	.17216
110.	.18006	.17412	.16879	.16423	.16059	.15797	.15646	.15609	.15689	.15882	.16183	.16583
120.	.17703	.17030	.16406	.15850	.15380	.15008	.14746	.14604	.14583	.14686	.14910	.15246
130.	.16668	.15918	.15205	.14551	.13974	.13493	.13123	.12874	.12754	.12767	.12913	.13186
140.	.14873	.14051	.13255	.12507	.11832	.11249	.10776	.10428	.10215	.10143	.10215	.10429
150.	.12333	.11450	.10581	.09753	.08992	.08320	.07758	.07323	.07028	.06882	.06890	.07051
160.	.09124	.08192	.07266	.06376	.05547	.04806	.04174	.03671	.03312	.03108	.03066	.03186
170.	.05374	.04411	.03449	.02518	.01647	.00861	.00184	-.00363	-.00763	-.01005	-.01080	-.00987
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261
10.	.03387	.04072	.04708	.05277	.05760	.06143	.06414	.06566	.06593	.06495	.06274	.05938
20.	.05962	.06646	.07283	.07854	.08341	.08731	.09011	.09172	.09211	.09124	.08916	.08592
30.	.08423	.09104	.09741	.10316	.10812	.11213	.11507	.11686	.11743	.11678	.11491	.11190
40.	.10727	.11402	.12040	.12621	.13128	.13545	.13860	.14064	.14149	.14113	.13958	.13688
50.	.12823	.13490	.14128	.14716	.15238	.15676	.16018	.16254	.16376	.16380	.16267	.16039
60.	.14649	.15306	.15943	.16540	.17079	.17543	.17919	.18196	.18363	.18418	.18357	.18183
70.	.16135	.16779	.17414	.18020	.18580	.19075	.19492	.19817	.20041	.20156	.20159	.20051
80.	.17202	.17829	.18461	.19078	.19661	.20192	.20656	.21038	.21327	.21513	.21592	.21561
90.	.17766	.18374	.19001	.19628	.20237	.20808	.21326	.21772	.22136	.22404	.22569	.22626
100.	.17746	.18330	.18951	.19589	.20225	.20841	.21416	.21935	.22380	.22738	.23000	.23155
110.	.17069	.17627	.18240	.18889	.19554	.20216	.20853	.21448	.21981	.22436	.22800	.23062
120.	.15686	.16216	.16819	.17478	.18172	.18881	.19582	.20255	.20878	.21434	.21905	.22277
130.	.13580	.14080	.14674	.15342	.16064	.16818	.17582	.18331	.19044	.19699	.20276	.20756
140.	.10777	.11251	.11834	.12509	.13257	.14054	.14875	.15697	.16493	.17240	.17916	.18499
150.	.07361	.07809	.08383	.09065	.09834	.10667	.11539	.12422	.13291	.14119	.14880	.15552
160.	.03464	.03893	.04460	.05146	.05932	.06793	.07704	.08636	.09561	.10451	.11280	.12021
170.	-.00728	-.00312	.00249	.00939	.01735	.02614	.03549	.04513	.05474	.06405	.07276	.08063

ALPHA = 70.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163
10.	.05440	.04832	.04166	.03464	.02746	.02034	.01350	.00715	-.00148	-.00335	-.00717	-.00988
20.	.08580	.07985	.07333	.06642	.05934	.05231	.04552	.03920	.03353	.02869	.02482	.02205
30.	.11657	.11087	.10458	.09788	.09097	.08407	.07739	.07113	.06547	.06060	.05666	.05376
40.	.14625	.14091	.13494	.12854	.12189	.11520	.10866	.10249	.09685	.09194	.08789	.08483
50.	.17425	.16939	.16387	.15787	.15156	.14514	.13881	.13276	.12716	.12219	.11801	.11473
60.	.19990	.19564	.19069	.18520	.17933	.17327	.16720	.16130	.15575	.15073	.14638	.14283
70.	.22238	.21886	.21460	.20973	.20441	.19879	.19304	.18734	.18186	.17677	.17222	.16836
80.	.24075	.23810	.23467	.23055	.22587	.22077	.21542	.20996	.20457	.19941	.19464	.19040
90.	.25397	.25233	.24984	.24658	.24266	.23817	.23327	.22810	.22282	.21759	.21257	.20791
100.	.26096	.26044	.25902	.25673	.25364	.24985	.24546	.24063	.23548	.23018	.22489	.21977
110.	.26069	.26139	.26112	.25987	.25769	.25465	.25083	.24636	.24137	.23600	.23043	.22482
120.	.25230	.25427	.25519	.25503	.25381	.25155	.24833	.24424	.23941	.23399	.22814	.22203
130.	.23525	.23847	.24058	.24151	.24123	.23976	.23714	.23344	.22879	.22331	.21718	.21059
140.	.20946	.21386	.21708	.21903	.21965	.21892	.21686	.21354	.20905	.20353	.19715	.19010
150.	.17544	.18086	.18506	.18791	.18931	.18923	.18766	.18466	.18032	.17477	.16818	.16074
160.	.13436	.14059	.14555	.14909	.15110	.15153	.15036	.14762	.14339	.13782	.13106	.12332
170.	.08803	.09477	.10022	.10421	.10662	.10737	.10645	.10388	.09973	.09415	.08728	.07935
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734
10.	-.01139	-.01166	-.01068	-.00848	-.00513	-.00072	.00461	.01069	.01735	.02437	.03155	.03867
20.	.02044	.02007	.02092	.02299	.02620	.03046	.03564	.04158	.04811	.05501	.06209	.06913
30.	.05201	.05144	.05208	.05391	.05687	.06088	.06581	.07150	.07780	.08450	.09141	.09830
40.	.08285	.08202	.08235	.08384	.08644	.09008	.09463	.09997	.10594	.11234	.11899	.12568
50.	.11246	.11127	.11119	.11223	.11435	.11749	.12156	.12642	.13194	.13794	.14425	.15067
60.	.14020	.13856	.13797	.13843	.13995	.14246	.14590	.15017	.15512	.16061	.16648	.17254
70.	.16529	.16311	.16189	.16166	.16244	.16419	.16687	.17040	.17465	.17952	.18484	.19047
80.	.18682	.18401	.18205	.18101	.18092	.18177	.18355	.18620	.18963	.19375	.19843	.20352
90.	.20375	.20022	.19743	.19546	.19436	.19419	.19493	.19657	.19905	.20231	.20624	.21072
100.	.21497	.21065	.20692	.20392	.20172	.20039	.19998	.20049	.20191	.20420	.20729	.21109
110.	.21935	.21417	.20945	.20533	.20194	.19937	.19771	.19701	.19729	.19853	.20071	.20375
120.	.21586	.20980	.20405	.19879	.19416	.19031	.18735	.18539	.18447	.18462	.18585	.18810
130.	.20373	.19681	.19005	.18364	.17779	.17266	.16843	.16521	.16310	.16217	.16244	.16391
140.	.18260	.17488	.16717	.15969	.15270	.14638	.14094	.13654	.13332	.13136	.13075	.13148
150.	.15269	.14426	.13572	.12733	.11933	.11198	.10549	.10006	.09587	.09302	.09162	.09170
160.	.11484	.10587	.09669	.08757	.07880	.07063	.06333	.05710	.05214	.04860	.04658	.04616
170.	.07059	.06127	.05168	.04210	.03283	.02414	.01631	.00957	.00412	.00013	-.00228	-.00304
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816
10.	.04551	.05186	.05753	.06235	.06618	.06889	.07040	.07067	.06969	.06749	.06413	.05973
20.	.07591	.08223	.08790	.09274	.09661	.09939	.10099	.10137	.10051	.09845	.09524	.09098
30.	.10499	.11125	.11690	.12178	.12572	.12861	.13037	.13094	.13029	.12846	.12550	.12150
40.	.13222	.13839	.14402	.14894	.15299	.15605	.15802	.15886	.15853	.15704	.15444	.15080
50.	.15700	.16305	.16865	.17362	.17780	.18108	.18335	.18454	.18462	.18358	.18146	.17832
60.	.17861	.18451	.19005	.19508	.19943	.20298	.20561	.20725	.20784	.20737	.20586	.20334
70.	.19621	.20191	.20739	.21248	.21703	.22090	.22397	.22615	.22737	.22759	.22681	.22506
80.	.20888	.21434	.21973	.22489	.22966	.23390	.23748	.24029	.24225	.24329	.24338	.24253
90.	.21562	.22079	.22607	.23130	.23632	.24098	.24514	.24867	.25147	.25344	.25453	.25471
100.	.21547	.22031	.22545	.23075	.23604	.24116	.24596	.25028	.25401	.25701	.25922	.26054
110.	.20757	.21204	.21704	.22240	.22797	.23358	.23906	.24423	.24895	.25307	.25646	.25903
120.	.19133	.19541	.20024	.20566	.21152	.21763	.22380	.22985	.23560	.24087	.24550	.24935
130.	.16654	.17023	.17489	.18037	.18650	.19309	.19995	.20687	.21363	.22004	.22589	.23101
140.	.13354	.13686	.14135	.14687	.15325	.16029	.16779	.17552	.18323	.19070	.19770	.20402
150.	.09327	.09627	.10061	.10616	.11275	.12019	.12824	.13667	.14521	.15360	.16160	.16895
160.	.04733	.05007	.05429	.05987	.06663	.07437	.08285	.09182	.10100	.11012	.11889	.12705
170.	-.00211	.00046	.00460	.01019	.01706	.02499	.03375	.04306	.05266	.06224	.07151	.08019

ALPHA = 80.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312
10.	.05212	.04548	.03846	.03130	.02419	.01736	.01102	.00536	.00055	-.00326	-.00596	-.00747
20.	.08729	.08081	.07395	.06692	.05993	.05320	.04693	.04131	.03652	.03270	.02995	.02838
30.	.12173	.11552	.10892	.10212	.09534	.08878	.08264	.07711	.07234	.06850	.06569	.06400
40.	.15488	.14908	.14286	.13641	.12993	.12362	.11766	.11225	.10753	.10367	.10076	.09891
50.	.18612	.18086	.17514	.16916	.16309	.15711	.15140	.14615	.14150	.13760	.13458	.13251
60.	.21468	.21010	.20503	.19964	.19408	.18852	.18314	.17809	.17354	.16961	.16643	.16409
70.	.23964	.23589	.23162	.22695	.22202	.21699	.21200	.20722	.20278	.19881	.19545	.19279
80.	.25996	.25720	.25386	.25005	.24587	.24146	.23696	.23248	.22819	.22419	.22062	.21758
90.	.27447	.27285	.27059	.26777	.26446	.26078	.25682	.25272	.24859	.24456	.24076	.23730
100.	.28198	.28163	.28058	.27886	.27653	.27365	.27032	.26663	.26270	.25865	.25459	.25066
110.	.28134	.28236	.28261	.28209	.28081	.27881	.27616	.27292	.26921	.26513	.26081	.25638
120.	.27159	.27403	.27563	.27636	.27618	.27510	.27315	.27040	.26692	.26283	.25824	.25330
130.	.25213	.25598	.25894	.26090	.26181	.26165	.26041	.25814	.25490	.25079	.24594	.24050
140.	.22290	.22808	.23229	.23542	.23736	.23806	.23749	.23567	.23266	.22854	.22345	.21754
150.	.18447	.19081	.19613	.20027	.20311	.20455	.20457	.20315	.20034	.19622	.19092	.18461
160.	.13819	.14542	.15160	.15654	.16008	.16211	.16259	.16148	.15883	.15471	.14925	.14262
170.	.08607	.09389	.10062	.10606	.11005	.11247	.11324	.11233	.10978	.10567	.10011	.09328
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419
10.	-.00774	-.00675	-.00455	-.00120	.00321	.00853	.01460	.02125	.02826	.03543	.04253	.04936
20.	.02802	.02889	.03096	.03417	.03841	.04357	.04948	.05596	.06282	.06986	.07684	.08357
30.	.06349	.06416	.06600	.06895	.07292	.07779	.08341	.08962	.09622	.10302	.10980	.11636
40.	.09816	.09855	.10006	.10264	.10621	.11067	.11588	.12168	.12790	.13435	.14083	.14714
50.	.13146	.13147	.13254	.13462	.13767	.14158	.14624	.15151	.15722	.16320	.16928	.17526
60.	.16267	.16220	.16271	.16418	.16656	.16977	.17374	.17832	.18338	.18878	.19434	.19989
70.	.19091	.18987	.18971	.19042	.19198	.19435	.19746	.20121	.20549	.21016	.21508	.22012
80.	.21517	.21346	.21250	.21232	.21292	.21429	.21639	.21915	.22249	.22630	.23048	.23488
90.	.23428	.23180	.22992	.22872	.22823	.22845	.22939	.23101	.23327	.23609	.23940	.24308
100.	.24697	.24363	.24076	.23842	.23670	.23564	.23529	.23564	.23669	.23841	.24074	.24362
110.	.25198	.24773	.24377	.24021	.23717	.23474	.23298	.23197	.23171	.23224	.23352	.23551
120.	.24815	.24296	.23787	.23305	.22865	.22478	.22158	.21914	.21754	.21681	.21699	.21807
130.	.23462	.22850	.22230	.21623	.21047	.20519	.20056	.19670	.19375	.19179	.19087	.19104
140.	.21099	.20399	.19676	.18952	.18249	.17588	.16990	.16472	.16050	.15737	.15543	.15474
150.	.17746	.16971	.16158	.15332	.14519	.13743	.13027	.12393	.11861	.11447	.11164	.11019
160.	.13502	.12668	.11785	.10880	.09980	.09114	.08306	.07583	.06965	.06471	.06117	.05914
170.	.08538	.07666	.06738	.05782	.04828	.03903	.03037	.02255	.01582	.01038	.00639	.00397
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279
10.	.05570	.06136	.06617	.06999	.07269	.07419	.07446	.07348	.07127	.06792	.06352	.05820
20.	.08984	.09546	.10025	.10408	.10682	.10839	.10875	.10788	.10581	.10261	.09836	.09320
30.	.12250	.12803	.13280	.13664	.13945	.14114	.14165	.14098	.13914	.13619	.13222	.12735
40.	.15310	.15851	.16323	.16710	.17000	.17185	.17260	.17221	.17070	.16813	.16455	.16009
50.	.18096	.18621	.19086	.19476	.19779	.19985	.20090	.20089	.19982	.19774	.19469	.19078
60.	.20527	.21032	.21488	.21881	.22199	.22432	.22575	.22621	.22570	.22424	.22186	.21864
70.	.22510	.22989	.23433	.23829	.24165	.24431	.24619	.24723	.24740	.24669	.24512	.24275
80.	.23939	.24387	.24816	.25216	.25573	.25877	.26118	.26289	.26385	.26403	.26343	.26206
90.	.24704	.25114	.25527	.25930	.26310	.26657	.26958	.27207	.27394	.27514	.27564	.27541
100.	.24695	.25064	.25457	.25862	.26268	.26661	.27030	.27363	.27651	.27885	.28057	.28163
110.	.23817	.24140	.24511	.24919	.25351	.25794	.26235	.26659	.27056	.27411	.27715	.27959
120.	.22002	.22277	.22625	.23034	.23493	.23987	.24502	.25021	.25530	.26012	.26452	.26839
130.	.19228	.19455	.19779	.20190	.20674	.21219	.21806	.22419	.23038	.23645	.24221	.24749
140.	.15531	.15713	.16014	.16425	.16934	.17525	.18181	.18880	.19603	.20327	.21030	.21691
150.	.11017	.11159	.11440	.11852	.12382	.13013	.13728	.14503	.15316	.16142	.16955	.17732
160.	.05866	.05977	.06242	.06654	.07200	.07863	.08623	.09457	.10340	.11245	.12145	.13011
170.	.00320	.00411	.00666	.01077	.01633	.02316	.03106	.03978	.04906	.05862	.06816	.07741

ALPHA = 90.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335
10.	.04820	.04119	.03404	.02694	.02013	.01380	.00815	.00335	-.00045	-.00314	-.00464	-.00490
20.	.08608	.07925	.07226	.06531	.05863	.05242	.04685	.04211	.03834	.03564	.03411	.03379
30.	.12313	.11660	.10989	.10321	.09676	.09074	.08533	.08068	.07696	.07426	.07267	.07224
40.	.15876	.15267	.14638	.14008	.13397	.12823	.12303	.11854	.11489	.11218	.11051	.10992
50.	.19229	.18678	.18105	.17527	.16961	.16425	.15934	.15505	.15149	.14878	.14700	.14621
60.	.22289	.21813	.21310	.20797	.20288	.19800	.19347	.18943	.18600	.18329	.18138	.18032
70.	.24959	.24573	.24157	.23723	.23285	.22856	.22449	.22076	.21749	.21478	.21270	.21133
80.	.27126	.26846	.26532	.26193	.25838	.25479	.25127	.24792	.24484	.24213	.23987	.23813
90.	.28664	.28508	.28312	.28081	.27822	.27544	.27255	.26964	.26678	.26408	.26161	.25945
100.	.29445	.29427	.29362	.29252	.29101	.28914	.28696	.28453	.28193	.27925	.27655	.27393
110.	.29346	.29476	.29553	.29575	.29540	.29451	.29309	.29120	.28889	.28622	.28328	.28017
120.	.28266	.28549	.28774	.28932	.29018	.29031	.28970	.28836	.28634	.28370	.28052	.27689
130.	.26140	.26577	.26947	.27240	.27448	.27562	.27581	.27502	.27330	.27069	.26727	.26314
140.	.22962	.23542	.24050	.24471	.24791	.25001	.25094	.25069	.24924	.24666	.24302	.23842
150.	.18797	.19502	.20130	.20661	.21080	.21373	.21532	.21552	.21433	.21177	.20793	.20293
160.	.13789	.14592	.15313	.15930	.16426	.16784	.16995	.17051	.16931	.16697	.16299	.15767
170.	.08158	.09023	.09804	.10477	.11022	.11422	.11666	.11745	.11657	.11406	.10997	.10445
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056
10.	-.00391	-.00170	.00165	.00606	.01138	.01745	.02409	.03109	.03825	.04535	.05216	.05849
20.	.03469	.03678	.04000	.04424	.04940	.05529	.06175	.06858	.07558	.08252	.08920	.09542
30.	.07298	.07487	.07785	.08183	.08669	.09228	.09843	.10496	.11167	.11835	.12480	.13082
40.	.11044	.11203	.11467	.11826	.12270	.12785	.13356	.13965	.14594	.15223	.15834	.16408
50.	.14642	.14763	.14981	.15288	.15676	.16132	.16644	.17194	.17768	.18346	.18912	.19448
60.	.18015	.18088	.18247	.18490	.18807	.19189	.19625	.20102	.20604	.21118	.21626	.22114
70.	.21070	.21084	.21173	.21335	.21566	.21858	.22202	.22589	.23005	.23439	.23877	.24306
80.	.23696	.23640	.23646	.23715	.23843	.24028	.24264	.24543	.24857	.25196	.25551	.25910
90.	.25767	.25631	.25542	.25503	.25514	.25576	.25687	.25843	.26039	.26270	.26528	.26806
100.	.27146	.26922	.26727	.26568	.26449	.26374	.26345	.26364	.26429	.26538	.26689	.26876
110.	.27696	.27377	.27068	.26780	.26521	.26298	.26119	.25990	.25913	.25891	.25925	.26015
120.	.27293	.26875	.26449	.26027	.25622	.25247	.24912	.24628	.24404	.24246	.24159	.24146
130.	.25843	.25328	.24785	.24230	.23681	.23153	.22664	.22227	.21856	.21563	.21356	.21242
140.	.23301	.22695	.22043	.21364	.20679	.20010	.19375	.18795	.18287	.17866	.17546	.17336
150.	.19691	.19006	.18259	.17473	.16670	.15877	.15116	.14411	.13783	.13252	.12833	.12540
160.	.15118	.14371	.13550	.12679	.11785	.10895	.10035	.09233	.08512	.07894	.07399	.07040
170.	.09766	.08980	.08112	.07187	.06234	.05281	.04359	.03494	.02713	.02040	.01495	.01094
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667
10.	.06414	.06894	.07274	.07543	.07693	.07718	.07619	.07399	.07063	.06623	.06091	.05484
20.	.10098	.10572	.10950	.11219	.11372	.11404	.11315	.11106	.10784	.10359	.09844	.09254
30.	.13623	.14087	.14460	.14730	.14889	.14932	.14858	.14669	.14371	.13973	.13487	.12928
40.	.16928	.17377	.17743	.18013	.18180	.18239	.18188	.18028	.17765	.17406	.16962	.16447
50.	.19938	.20368	.20724	.20994	.21172	.21252	.21231	.21110	.20892	.20585	.20197	.19740
60.	.22567	.22971	.23314	.23585	.23777	.23883	.23899	.23827	.23667	.23425	.23108	.22726
70.	.24713	.25086	.25413	.25684	.25891	.26029	.26091	.26078	.25989	.25826	.25595	.25304
80.	.26262	.26598	.26905	.27176	.27402	.27576	.27693	.27749	.27743	.27675	.27546	.27361
90.	.27096	.27387	.27673	.27943	.28189	.28405	.28584	.28720	.28809	.28848	.28836	.28774
100.	.27095	.27337	.27597	.27866	.28135	.28397	.28644	.28869	.29063	.29223	.29341	.29416
110.	.26156	.26346	.26577	.26844	.27137	.27449	.27770	.28089	.28397	.28686	.28945	.29167
120.	.24207	.24341	.24543	.24807	.25125	.25488	.25884	.26302	.26728	.27150	.27555	.27931
130.	.21223	.21301	.21474	.21735	.22077	.22490	.22961	.23476	.24019	.24573	.25123	.25650
140.	.17243	.17268	.17413	.17671	.18036	.18495	.19036	.19642	.20294	.20973	.21658	.22328
150.	.12381	.12361	.12480	.12736	.13120	.13620	.14222	.14906	.15654	.16440	.17243	.18036
160.	.06830	.06774	.06874	.07127	.07526	.08058	.08707	.09453	.10274	.11145	.12039	.12930
170.	.00851	.00772	.00859	.01111	.01519	.02071	.02751	.03537	.04405	.05330	.06283	.07235

ALPHA = 100.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234
10.	.04275	.03560	.02851	.02170	.01539	.00975	.00496	.00117	-.00151	-.00299	-.00324	-.00224
20.	.08219	.07522	.06831	.06167	.05549	.04998	.04529	.04156	.03892	.03744	.03717	.03811
30.	.12073	.11407	.10747	.10110	.09518	.08988	.08536	.08175	.07917	.07770	.07738	.07822
40.	.15776	.15157	.14540	.13944	.13389	.12889	.12461	.12118	.11869	.11724	.11685	.11754
50.	.19257	.18699	.18141	.17600	.17093	.16634	.16239	.15919	.15683	.15539	.15491	.15541
60.	.22430	.21949	.21466	.20994	.20548	.20142	.19788	.19497	.19277	.19136	.19077	.19103
70.	.25193	.24807	.24415	.24027	.23657	.23315	.23011	.22756	.22556	.22418	.22345	.22341
80.	.27429	.27155	.26870	.26583	.26302	.26036	.25792	.25579	.25403	.25269	.25181	.25141
90.	.29009	.28864	.28702	.28530	.28352	.28173	.27998	.27834	.27685	.27556	.27450	.27371
100.	.29798	.29796	.29773	.29729	.29666	.29584	.29487	.29378	.29260	.29136	.29011	.28887
110.	.29669	.29823	.29949	.30043	.30103	.30127	.30114	.30064	.29979	.29862	.29715	.29544
120.	.28517	.28832	.29113	.29351	.29540	.29673	.29747	.29759	.29709	.29598	.29430	.29210
130.	.26277	.26752	.27186	.27567	.27884	.28126	.28286	.28359	.28344	.28240	.28050	.27782
140.	.22943	.23567	.24146	.24661	.25097	.25441	.25683	.25814	.25831	.25733	.25524	.25210
150.	.18583	.19338	.20042	.20674	.21215	.21648	.21959	.22141	.22187	.22095	.21869	.21515
160.	.13348	.14205	.15007	.15730	.16352	.16855	.17222	.17443	.17511	.17424	.17184	.16799
170.	.07469	.08391	.09256	.10038	.10712	.11259	.11662	.11908	.11990	.11906	.11658	.11254
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623
10.	-.00002	.00334	.00775	.01307	.01914	.02578	.03278	.03993	.04702	.05383	.06015	.06578
20.	.04024	.04348	.04776	.05292	.05882	.06527	.07209	.07906	.08597	.09262	.09879	.10431
30.	.08019	.08324	.08727	.09217	.09777	.10391	.11041	.11706	.12367	.13003	.13595	.14126
40.	.11929	.12206	.12574	.13023	.13541	.14109	.14713	.15332	.15949	.16544	.17100	.17600
50.	.15687	.15925	.16247	.16644	.17104	.17612	.18153	.18711	.19270	.19810	.20318	.20776
60.	.19212	.19401	.19665	.19995	.20382	.20814	.21277	.21757	.22241	.22713	.23158	.23564
70.	.22405	.22536	.22728	.22978	.23276	.23614	.23981	.24367	.24760	.25147	.25517	.25860
80.	.25152	.25213	.25322	.25475	.25668	.25895	.26150	.26424	.26709	.26996	.27277	.27543
90.	.27321	.27302	.27314	.27357	.27430	.27530	.27654	.27799	.27960	.28133	.28311	.28490
100.	.28770	.28662	.28566	.28487	.28425	.28383	.28363	.28364	.28387	.28431	.28494	.28576
110.	.29354	.29150	.28939	.28727	.28521	.28326	.28149	.27995	.27869	.27775	.27715	.27691
120.	.28944	.28641	.28310	.27961	.27604	.27251	.26911	.26597	.26316	.26077	.25889	.25755
130.	.27441	.27040	.26590	.26105	.25599	.25089	.24588	.24114	.23679	.23298	.22981	.22739
140.	.24800	.24307	.23745	.23132	.22487	.21829	.21178	.20553	.19974	.19459	.19023	.18679
150.	.21044	.20471	.19812	.19088	.18322	.17535	.16752	.15997	.15293	.14661	.14121	.13688
160.	.16281	.15645	.14911	.14101	.13239	.12352	.11467	.10611	.09808	.09085	.08463	.07961
170.	.10705	.10029	.09247	.08381	.07458	.06507	.05556	.04634	.03769	.02988	.02313	.01767
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998
10.	.07057	.07436	.07704	.07852	.07877	.07777	.07556	.07219	.06778	.06246	.05639	.04975
20.	.10900	.11272	.11536	.11684	.11711	.11617	.11405	.11080	.10653	.10137	.09547	.08901
30.	.14578	.14938	.15196	.15343	.15375	.15291	.15094	.14789	.14386	.13897	.13337	.12722
40.	.18027	.18371	.18619	.18765	.18804	.18734	.18559	.18283	.17915	.17465	.16948	.16379
50.	.21171	.21492	.21728	.21871	.21919	.21869	.21723	.21485	.21163	.20766	.20307	.19798
60.	.23918	.24210	.24429	.24571	.24630	.24604	.24495	.24306	.24042	.23712	.23325	.22893
70.	.26163	.26419	.26619	.26757	.26829	.26833	.26769	.26639	.26446	.26197	.25899	.25561
80.	.27787	.28000	.28176	.28310	.28398	.28437	.28426	.28366	.28257	.28104	.27911	.27683
90.	.28664	.28829	.28978	.29107	.29213	.29292	.29342	.29361	.29349	.29306	.29233	.29133
100.	.28673	.28782	.28900	.29024	.29150	.29273	.29390	.29498	.29594	.29673	.29735	.29777
110.	.27704	.27754	.27839	.27956	.28103	.28274	.28464	.28668	.28879	.29091	.29297	.29492
120.	.25682	.25670	.25720	.25831	.25999	.26219	.26484	.26787	.27118	.27468	.27824	.28178
130.	.22579	.22506	.22521	.22625	.22815	.23084	.23424	.23825	.24275	.24760	.25266	.25777
140.	.18438	.18306	.18289	.18387	.18596	.18910	.19320	.19814	.20375	.20988	.21633	.22292
150.	.13376	.13194	.13149	.13240	.13466	.13820	.14291	.14864	.15523	.16247	.17014	.17800
160.	.07594	.07373	.07305	.07392	.07632	.08016	.08534	.09170	.09904	.10715	.11576	.12463
170.	.01364	.01118	.01036	.01120	.01368	.01772	.02321	.02996	.03779	.04645	.05567	.06518



ALPHA = 110.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.00429	.01143	.01828	.02464	.03032	.03513	.03894	.04163	.04312	.04335	.04234	.04010
10.	.03594	.02886	.02206	.01575	.01012	.00534	.00156	.00111	.00258	.00281	.00180	.00043
20.	.07575	.06885	.06223	.05608	.05061	.04596	.04228	.03969	.03827	.03804	.03904	.04121
30.	.11461	.10803	.10172	.09587	.09065	.08623	.08273	.08027	.07892	.07872	.07968	.08176
40.	.15192	.14581	.13995	.13451	.12968	.12558	.12234	.12007	.11884	.11867	.11958	.12153
50.	.18696	.18147	.17621	.17134	.16700	.16334	.16045	.15843	.15735	.15722	.15806	.15984
60.	.21886	.21415	.20965	.20549	.20180	.19868	.19624	.19454	.19364	.19357	.19432	.19588
70.	.24659	.24285	.23928	.23598	.23307	.23062	.22871	.22740	.22674	.22673	.22738	.22867
80.	.26898	.26637	.26390	.26163	.25964	.25798	.25671	.25586	.25547	.25553	.25606	.25703
90.	.28471	.28341	.28220	.28111	.28018	.27944	.27890	.27858	.27850	.27865	.27903	.27964
100.	.29245	.29261	.29281	.29303	.29328	.29355	.29383	.29410	.29437	.29461	.29484	.29503
110.	.29092	.29265	.29436	.29601	.29753	.29889	.30004	.30095	.30159	.30195	.30200	.30175
120.	.27905	.28241	.28570	.28882	.29166	.29416	.29622	.29779	.29882	.29928	.29916	.29845
130.	.25620	.26118	.26603	.27061	.27477	.27839	.28135	.28358	.28500	.28556	.28526	.28409
140.	.22232	.22882	.23514	.24108	.24647	.25114	.25496	.25780	.25958	.26024	.25977	.25817
150.	.17811	.18593	.19352	.20065	.20712	.21271	.21726	.22063	.22273	.22348	.22286	.22089
160.	.12510	.13395	.14253	.15060	.15790	.16420	.16933	.17312	.17546	.17628	.17554	.17329
170.	.06562	.07513	.08436	.09302	.10085	.10762	.11311	.11717	.11967	.12053	.11972	.11728
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03670	.03225	.02688	.02076	.01406	.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105
10.	.00380	.00822	.01354	.01962	.02626	.03326	.04042	.04750	.05430	.06061	.06624	.07102
20.	.04450	.04881	.05400	.05992	.06639	.07322	.08018	.08708	.09370	.09984	.10532	.10997
30.	.08491	.08903	.09399	.09964	.10582	.11233	.11897	.12555	.13186	.13771	.14293	.14735
40.	.12447	.12831	.13294	.13820	.14395	.15000	.15617	.16228	.16814	.17358	.17841	.18251
50.	.16251	.16598	.17015	.17490	.18007	.18552	.19107	.19656	.20182	.20669	.21102	.21469
60.	.19820	.20120	.20481	.20889	.21334	.21802	.22278	.22748	.23198	.23614	.23984	.24296
70.	.23056	.23299	.23590	.23918	.24275	.24649	.25029	.25403	.25760	.26089	.26381	.26626
80.	.25842	.26018	.26226	.26459	.26711	.26974	.27239	.27500	.27747	.27974	.28173	.28339
90.	.28044	.28143	.28255	.28380	.28511	.28646	.28781	.28911	.29032	.29141	.29234	.29309
100.	.29519	.29531	.29538	.29540	.29538	.29530	.29519	.29503	.29483	.29461	.29436	.29409
110.	.30121	.30039	.29932	.29803	.29656	.29495	.29325	.29152	.28981	.28817	.28664	.28529
120.	.29718	.29539	.29313	.29048	.28750	.28430	.28097	.27761	.27432	.27121	.26836	.26586
130.	.28210	.27935	.27592	.27191	.26744	.26266	.25770	.25272	.24787	.24330	.23914	.23552
140.	.25551	.25185	.24731	.24203	.23617	.22991	.22343	.21693	.21061	.20467	.19928	.19461
150.	.21764	.21319	.20770	.20131	.19423	.18667	.17887	.17105	.16346	.15632	.14986	.14427
160.	.16957	.16452	.15827	.15102	.14299	.13443	.12559	.11674	.10815	.10009	.09279	.08648
170.	.11327	.10782	.10109	.09329	.08465	.07544	.06593	.05642	.04720	.03854	.03071	.02394
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292
10.	.07480	.07746	.07894	.07917	.07816	.07593	.07256	.06814	.06281	.05674	.05010	.04309
20.	.11364	.11624	.11766	.11788	.11689	.11472	.11143	.10712	.10193	.09600	.08953	.08271
30.	.15084	.15330	.15465	.15485	.15390	.15181	.14866	.14455	.13958	.13393	.12776	.12125
40.	.18574	.18801	.18925	.18942	.18851	.18656	.18362	.17978	.17515	.16989	.16414	.15809
50.	.21757	.21959	.22068	.22080	.21996	.21818	.21552	.21204	.20787	.20313	.19795	.19251
60.	.24540	.24710	.24800	.24807	.24732	.24576	.24344	.24043	.23683	.23274	.22829	.22362
70.	.26816	.26947	.27014	.27015	.26950	.26821	.26631	.26388	.26098	.25769	.25413	.25039
80.	.28466	.28551	.28590	.28584	.28531	.28434	.28295	.28119	.27911	.27678	.27426	.27163
90.	.29363	.29394	.29403	.29387	.29349	.29289	.29208	.29110	.28997	.28873	.28741	.28606
100.	.29382	.29354	.29328	.29303	.29280	.29261	.29245	.29233	.29226	.29224	.29227	.29234
110.	.28413	.28322	.28258	.28223	.28218	.28242	.28297	.28378	.28486	.28615	.28762	.28923
120.	.26380	.26223	.26120	.26074	.26087	.26157	.26284	.26463	.26689	.26955	.27252	.27572
130.	.23255	.23033	.22891	.22835	.22865	.22981	.23180	.23456	.23799	.24200	.24646	.25125
140.	.19079	.18795	.18617	.18551	.18598	.18757	.19024	.19390	.19843	.20371	.20958	.21584
150.	.13972	.13634	.13425	.13350	.13412	.13608	.13934	.14378	.14928	.15667	.16275	.17030
160.	.08135	.07756	.07522	.07441	.07514	.07740	.08111	.08617	.09242	.09966	.10769	.11626
170.	.01844	.01438	.01189	.01103	.01183	.01428	.01829	.02374	.03047	.03827	.04691	.05612

ALPHA = 120.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670
10.	.02798	.02118	.01487	.00925	.00448	.00071	-.00195	-.00341	-.00363	-.00261	-.00037	.00301
20.	.06694	.06032	.05419	.04874	.04412	.04048	.03793	.03655	.03638	.03743	.03965	.04300
30.	.10495	.09865	.09282	.08766	.08330	.07990	.07754	.07630	.07621	.07729	.07950	.08276
40.	.14141	.13556	.13019	.12544	.12147	.11839	.11630	.11527	.11531	.11644	.11861	.12177
50.	.17561	.17038	.16560	.16142	.15795	.15532	.15359	.15282	.15303	.15422	.15635	.15936
60.	.20672	.20227	.19824	.19476	.19194	.18986	.18858	.18815	.18858	.18985	.19192	.19474
70.	.23373	.23021	.22710	.22449	.22245	.22105	.22032	.22030	.22099	.22235	.22436	.22694
80.	.25547	.25307	.25105	.24946	.24834	.24774	.24767	.24813	.24912	.25059	.25251	.25481
90.	.27068	.26957	.26880	.26837	.26832	.26864	.26932	.27033	.27166	.27325	.27507	.27705
100.	.27806	.27838	.27899	.27987	.28100	.28234	.28385	.28548	.28718	.28891	.29061	.29223
110.	.27633	.27820	.28031	.28260	.28500	.28744	.28984	.29213	.29424	.29611	.29768	.29890
120.	.26449	.26796	.27163	.27537	.27909	.28267	.28600	.28897	.29150	.29352	.29495	.29575
130.	.24190	.24696	.25217	.25736	.26239	.26710	.27134	.27499	.27793	.28009	.28138	.28177
140.	.20852	.21507	.22172	.22828	.23453	.24029	.24539	.24967	.25300	.25529	.25645	.25645
150.	.16505	.17289	.18080	.18854	.19586	.20254	.20838	.21321	.21688	.21927	.22032	.21999
160.	.11299	.12185	.13074	.13939	.14754	.15494	.16137	.16663	.17055	.17303	.17399	.17339
170.	.05464	.06415	.07367	.08291	.09159	.09945	.10625	.11178	.11588	.11841	.11930	.11854

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486
10.	.00744	.01278	.01887	.02551	.03252	.03968	.04676	.05356	.05987	.06550	.07027	.07404
20.	.04735	.05259	.05855	.06505	.07189	.07887	.08578	.09239	.09852	.10398	.10860	.11223
30.	.08699	.09205	.09779	.10404	.11060	.11727	.12386	.13016	.13598	.14115	.14550	.14891
40.	.12581	.13062	.13604	.14191	.14806	.15429	.16042	.16627	.17164	.17639	.18036	.18344
50.	.16315	.16762	.17261	.17799	.18359	.18923	.19475	.19998	.20476	.20895	.21241	.21505
60.	.19822	.20224	.20670	.21144	.21634	.22124	.22599	.23045	.23448	.23795	.24078	.24286
70.	.23002	.23352	.23731	.24129	.24533	.24932	.25313	.25664	.25975	.26236	.26440	.26581
80.	.25743	.26029	.26330	.26637	.26940	.27231	.27500	.27739	.27942	.28101	.28213	.28273
90.	.27914	.28126	.28337	.28538	.28725	.28892	.29033	.29144	.29221	.29264	.29269	.29237
100.	.29371	.29502	.29612	.29696	.29753	.29781	.29779	.29746	.29685	.29597	.29484	.29350
110.	.29974	.30016	.30016	.29974	.29891	.29769	.29613	.29426	.29215	.28986	.28746	.28502
120.	.29591	.29542	.29429	.29255	.29026	.28749	.28432	.28085	.27719	.27344	.26972	.26614
130.	.28126	.27985	.27759	.27454	.27081	.26650	.26174	.25668	.25147	.24628	.24125	.23654
140.	.25531	.25304	.24972	.24545	.24035	.23460	.22835	.22180	.21515	.20859	.20234	.19658
150.	.21828	.21527	.21102	.20568	.19941	.19239	.18485	.17700	.16909	.16136	.15404	.14736
160.	.17125	.16765	.16269	.15651	.14932	.14132	.13276	.12390	.11501	.10636	.09821	.09081
170.	.11612	.11215	.10672	.10001	.09222	.08359	.07438	.06487	.05535	.04611	.03743	.02957

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429
10.	.07669	.07815	.07838	.07735	.07511	.07173	.06730	.06196	.05588	.04923	.04222	.03506
20.	.11478	.11616	.11633	.11529	.11306	.10972	.10536	.10013	.09417	.08767	.08082	.07384
30.	.15127	.15251	.15259	.15152	.14931	.14604	.14182	.13675	.13101	.12477	.11821	.11154
40.	.18553	.18656	.18652	.18539	.18322	.18006	.17602	.17121	.16579	.15992	.15377	.14754
50.	.21678	.21755	.21733	.21614	.21401	.21100	.20721	.20275	.19775	.19238	.18678	.18114
60.	.24413	.24456	.24414	.24287	.24079	.23797	.23450	.23047	.22602	.22127	.21637	.21147
70.	.26653	.26655	.26587	.26450	.26250	.25991	.25683	.25333	.24954	.24556	.24152	.23753
80.	.28280	.28233	.28135	.27988	.27796	.27565	.27303	.27017	.26717	.26410	.26107	.25816
90.	.29169	.29068	.28935	.28776	.28594	.28396	.28187	.27975	.27764	.27563	.27376	.27209
100.	.29200	.29036	.28866	.28693	.28523	.28361	.28213	.28082	.27973	.27888	.27831	.27803
110.	.28262	.28033	.27822	.27635	.27478	.27356	.27273	.27230	.27230	.27272	.27355	.27477
120.	.26282	.25984	.25731	.25530	.25387	.25306	.25290	.25339	.25453	.25626	.25855	.26132
130.	.23230	.22865	.22571	.22356	.22226	.22187	.22239	.22379	.22605	.22910	.23283	.23714
140.	.19148	.18720	.18386	.18158	.18042	.18041	.18156	.18383	.18715	.19142	.19652	.20227
150.	.14151	.13668	.13301	.13062	.12958	.12991	.13161	.13463	.13887	.14421	.15048	.15750
160.	.08438	.07912	.07519	.07272	.07176	.07236	.07449	.07810	.08306	.08923	.09643	.10443
170.	.02277	.01724	.01314	.01061	.00972	.01049	.01290	.01687	.02230	.02901	.03680	.04543

ALPHA = 130.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.01828	.02464	.03032	.03513	.03894	.04163	.04312	.04335	.04234	.04010	.03670	.03225
10.	.01910	.01280	.00717	.00240	.00136	.00401	.00546	.00568	.00464	.00239	.00101	.00545
20.	.05604	.04991	.04445	.03985	.03623	.03371	.03237	.03224	.03333	.03561	.03900	.04341
30.	.09204	.08621	.08105	.07673	.07337	.07108	.06992	.06994	.07113	.07345	.07684	.08119
40.	.12655	.12115	.11642	.11251	.10952	.10756	.10667	.10690	.10823	.11062	.11399	.11825
50.	.15889	.15408	.14992	.14654	.14405	.14252	.14200	.14250	.14401	.14649	.14985	.15399
60.	.18827	.18419	.18076	.17807	.17620	.17522	.17515	.17600	.17774	.18031	.18365	.18764
70.	.21373	.21055	.20800	.20614	.20504	.20472	.20521	.20647	.20849	.21118	.21448	.21828
80.	.23418	.23207	.23055	.22968	.22948	.22995	.23108	.23284	.23517	.23800	.24126	.24482
90.	.24843	.24754	.24721	.24747	.24829	.24966	.25154	.25386	.25655	.25954	.26273	.26603
100.	.25521	.25569	.25670	.25821	.26018	.26255	.26524	.26818	.27127	.27443	.27755	.28054
110.	.25337	.25531	.25776	.26062	.26382	.26726	.27084	.27444	.27796	.28129	.28433	.28698
120.	.24193	.24540	.24932	.25359	.25807	.26262	.26711	.27139	.27535	.27885	.28180	.28410
130.	.22029	.22528	.23068	.23634	.24208	.24773	.25312	.25808	.26246	.26614	.26899	.27093
140.	.18844	.19485	.20163	.20859	.21551	.22219	.22842	.23401	.23880	.24263	.24539	.24699
150.	.14704	.15468	.16266	.17076	.17871	.18628	.19324	.19938	.20451	.20847	.21115	.21246
160.	.09752	.10612	.11505	.12403	.13278	.14105	.14858	.15514	.16054	.16460	.16721	.16829
170.	.04207	.05129	.06082	.07036	.07963	.08835	.09624	.10308	.10864	.11277	.11534	.11627

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.02688	.02076	.01406	.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754
10.	.01080	.01690	.02355	.03057	.03773	.04482	.05163	.05794	.06356	.06833	.07209	.07474
20.	.04870	.05471	.06125	.06813	.07515	.08207	.08870	.09484	.10029	.10490	.10851	.11103
30.	.08637	.09222	.09856	.10521	.11196	.11860	.12493	.13077	.13592	.14025	.14361	.14590
40.	.12327	.12890	.13495	.14126	.14762	.15385	.15975	.16515	.16987	.17379	.17678	.17874
50.	.15879	.16411	.16978	.17563	.18148	.18715	.19247	.19729	.20145	.20482	.20731	.20884
60.	.19216	.19709	.20227	.20753	.21273	.21770	.22230	.22637	.22981	.23250	.23437	.23535
70.	.22246	.22691	.23148	.23603	.24043	.24455	.24825	.25143	.25398	.25584	.25695	.25726
80.	.24860	.25247	.25632	.26003	.26349	.26658	.26923	.27134	.27286	.27373	.27394	.27347
90.	.26933	.27254	.27556	.27829	.28066	.28258	.28401	.28490	.28523	.28497	.28415	.28278
100.	.28331	.28577	.28786	.28950	.29065	.29127	.29135	.29087	.28986	.28835	.28638	.28401
110.	.28917	.29083	.29190	.29237	.29220	.29141	.29003	.28808	.28564	.28278	.27957	.27613
120.	.28568	.28650	.28652	.28576	.28423	.28198	.27907	.27560	.27167	.26740	.26293	.25837
130.	.27191	.27188	.27087	.26888	.26599	.26228	.25787	.25289	.24749	.24183	.23609	.23044
140.	.24740	.24658	.24458	.24145	.23729	.23222	.22639	.21999	.21320	.20624	.19932	.19264
150.	.21236	.21086	.20800	.20387	.19860	.19234	.18528	.17764	.16966	.16156	.15361	.14604
160.	.16781	.16577	.16224	.15733	.15118	.14400	.13598	.12738	.11845	.10948	.10072	.09245
170.	.11553	.11315	.10919	.10378	.09708	.08929	.08066	.07144	.06191	.05237	.04310	.03438

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	.00429	.01143
10.	.07620	.07641	.07537	.07312	.06973	.06529	.05993	.05384	.04718	.04016	.03300	.02591
20.	.11238	.11250	.11141	.10914	.10574	.10133	.09604	.09004	.08349	.07661	.06960	.06267
30.	.14705	.14704	.14585	.14352	.14014	.13579	.13061	.12476	.11841	.11176	.10502	.09838
40.	.17962	.17940	.17807	.17568	.17231	.16804	.16302	.15740	.15135	.14504	.13868	.13245
50.	.20936	.20886	.20735	.20488	.20152	.19738	.19257	.18726	.18159	.17574	.16989	.16422
60.	.23541	.23457	.23283	.23025	.22692	.22293	.21840	.21348	.20830	.20304	.19784	.19287
70.	.25678	.25551	.25350	.25080	.24750	.24370	.23952	.23507	.23050	.22595	.22155	.21743
80.	.27233	.27057	.26824	.26541	.26216	.25859	.25481	.25094	.24709	.24338	.23993	.23683
90.	.28090	.27858	.27589	.27290	.26971	.26641	.26311	.25990	.25688	.25415	.25178	.24986
100.	.28132	.27838	.27529	.27213	.26901	.26602	.26325	.26079	.25870	.25706	.25591	.25529
110.	.27256	.26896	.26544	.26211	.25907	.25642	.25423	.25257	.25149	.25103	.25120	.25198
120.	.25389	.24960	.24565	.24214	.23920	.23690	.23532	.23450	.23447	.23524	.23677	.23902
130.	.22505	.22009	.21571	.21203	.20918	.20724	.20626	.20628	.20730	.20929	.21218	.21588
140.	.18641	.18082	.17604	.17221	.16945	.16784	.16744	.16825	.17025	.17338	.17755	.18262
150.	.13908	.13294	.12781	.12385	.12117	.11986	.11996	.12146	.12432	.12845	.13372	.13998
160.	.08492	.07836	.07296	.06890	.06629	.06521	.06570	.06773	.07126	.07617	.08232	.08951
170.	.02649	.01965	.01409	.00996	.00739	.00646	.00720	.00958	.01354	.01895	.02565	.03344

ALPHA = 140.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688
10.	.00959	.00396	-.00081	-.00457	-.00722	-.00867	-.00887	-.00783	-.00557	-.00216	.00229	.00765
20.	.04338	.03791	.03330	.02969	.02718	.02586	.02576	.02689	.02921	.03265	.03711	.04245
30.	.07629	.07109	.06676	.06341	.06115	.06004	.06013	.06140	.06382	.06732	.07179	.07709
40.	.10780	.10301	.09907	.09610	.09419	.09340	.09375	.09523	.09780	.10137	.10585	.11109
50.	.13730	.13305	.12963	.12717	.12573	.12535	.12605	.12781	.13057	.13425	.13873	.14389
60.	.16406	.16049	.15774	.15592	.15507	.15522	.15636	.15846	.16145	.16525	.16975	.17479
70.	.18722	.18447	.18254	.18149	.18136	.18214	.18382	.18633	.18961	.19356	.19805	.20295
80.	.20576	.20400	.20303	.20290	.20361	.20514	.20744	.21044	.21405	.21816	.22264	.22737
90.	.21861	.21797	.21811	.21903	.22071	.22309	.22610	.22965	.23363	.23792	.24239	.24691
100.	.22462	.22523	.22660	.22870	.23145	.23477	.23857	.24273	.24711	.25160	.25604	.26032
110.	.22273	.22469	.22739	.23074	.23464	.23898	.24362	.24842	.25324	.25793	.26234	.26635
120.	.21205	.21541	.21948	.22413	.22923	.23462	.24013	.24559	.25085	.25574	.26011	.26383
130.	.19204	.19680	.20223	.20817	.21445	.22087	.22724	.23336	.23905	.24414	.24846	.25189
140.	.16270	.16876	.17547	.18262	.19000	.19739	.20456	.21129	.21738	.22264	.22692	.23007
150.	.12463	.13183	.13965	.14785	.15620	.16443	.17229	.17955	.18598	.19139	.19562	.19854
160.	.07917	.08725	.09594	.10496	.11406	.12294	.13134	.13901	.14571	.15124	.15543	.15816
170.	.02832	.03697	.04621	.05576	.06533	.07464	.08339	.09132	.09819	.10379	.10796	.11056

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903
10.	.01376	.02043	.02746	.03464	.04174	.04855	.05486	.06049	.06526	.06902	.07167	.07312
20.	.04851	.05510	.06204	.06909	.07606	.08272	.08888	.09435	.09896	.10257	.10508	.10640
30.	.08306	.08952	.09628	.10313	.10986	.11627	.12215	.12734	.13168	.13503	.13729	.13840
40.	.11693	.12320	.12971	.13626	.14264	.14868	.15417	.15896	.16290	.16587	.16778	.16857
50.	.14956	.15557	.16174	.16788	.17380	.17934	.18430	.18856	.19197	.19443	.19587	.19625
60.	.18023	.18591	.19165	.19727	.20261	.20751	.21181	.21539	.21813	.21995	.22080	.22066
70.	.20811	.21337	.21858	.22357	.22820	.23232	.23580	.23855	.24048	.24152	.24166	.24088
80.	.23219	.23696	.24153	.24577	.24954	.25274	.25526	.25703	.25800	.25812	.25741	.25589
90.	.25133	.25552	.25936	.26273	.26552	.26766	.26907	.26971	.26957	.26865	.26697	.26459
100.	.26429	.26784	.27085	.27324	.27494	.27589	.27606	.27545	.27408	.27199	.26924	.26591
110.	.26982	.27266	.27478	.27612	.27663	.27630	.27513	.27317	.27048	.26712	.26322	.25888
120.	.26679	.26890	.27008	.27032	.26959	.26793	.26537	.26201	.25794	.25328	.24819	.24280
130.	.25433	.25570	.25595	.25509	.25314	.25015	.24622	.24146	.23603	.23009	.22381	.21739
140.	.23202	.23269	.23207	.23018	.22707	.22284	.21761	.21156	.20485	.19769	.19031	.18292
150.	.20005	.20011	.19873	.19594	.19182	.18651	.18015	.17296	.16514	.15694	.14859	.14036
160.	.15933	.15892	.15693	.15344	.14853	.14237	.13514	.12706	.11838	.10935	.10026	.09137
170.	.11151	.11079	.10842	.10447	.09906	.09236	.08456	.07591	.06667	.05712	.04754	.03824

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828
10.	.07333	.07228	.07002	.06661	.06216	.05680	.05069	.04402	.03699	.02982	.02272	.01590
20.	.10650	.10537	.10305	.09961	.09515	.08981	.08375	.07715	.07022	.06317	.05620	.04954
30.	.13831	.13704	.13462	.13112	.12665	.12135	.11538	.10892	.10216	.09531	.08858	.08217
40.	.16822	.16674	.16417	.16059	.15612	.15088	.14503	.13876	.13225	.12571	.11932	.11329
50.	.19555	.19379	.19103	.18735	.18287	.17772	.17205	.16604	.15987	.15372	.14780	.14227
60.	.21952	.21741	.21442	.21062	.20613	.20108	.19564	.18996	.18423	.17860	.17326	.16836
70.	.23920	.23669	.23341	.22946	.22497	.22007	.21491	.20965	.20444	.19945	.19482	.19070
80.	.25359	.25059	.24698	.24287	.23838	.23366	.22884	.22407	.21950	.21526	.21148	.20829
90.	.26158	.25803	.25405	.24976	.24529	.24078	.23635	.23216	.22832	.22495	.22216	.22002
100.	.26211	.25796	.25357	.24909	.24464	.24037	.23640	.23285	.22983	.22744	.22575	.22480
110.	.25424	.24944	.24462	.23994	.23552	.23152	.22804	.22520	.22308	.22174	.22123	.22156
120.	.23729	.23182	.22657	.22168	.21731	.21358	.21063	.20852	.20734	.20710	.20783	.20949
130.	.21102	.20490	.19921	.19412	.18980	.18637	.18393	.18256	.18231	.18317	.18512	.18811
140.	.17575	.16902	.16293	.15767	.15340	.15024	.14829	.14762	.14824	.15013	.15324	.15747
150.	.13250	.12524	.11881	.11339	.10917	.10625	.10474	.10467	.10606	.10885	.11297	.11828
160.	.08297	.07530	.06860	.06307	.05888	.05616	.05498	.05540	.05738	.06088	.06578	.07194
170.	.02949	.02156	.01469	.00908	.00492	.00232	.00137	.00209	.00446	.00841	.01382	.02052

ALPHA = 150.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076
10.	-.00028	-.00506	-.00882	-.01147	-.01292	-.01313	-.01208	-.00981	-.00639	-.00193	.00344	.00956
20.	.02934	.02470	.02108	.01856	.01724	.01716	.01830	.02065	.02413	.02863	.03402	.04013
30.	.05815	.05376	.05038	.04810	.04701	.04712	.04844	.05093	.05451	.05908	.06449	.07058
40.	.08572	.08168	.07865	.07671	.07594	.07634	.07791	.08061	.08434	.08899	.09443	.10049
50.	.11149	.10792	.10536	.10389	.10353	.10432	.10622	.10918	.11311	.11788	.12335	.12936
60.	.13483	.13186	.12990	.12900	.12918	.13045	.13277	.13605	.14022	.14513	.15064	.15658
70.	.15498	.15275	.15151	.15130	.15214	.15399	.15680	.16049	.16494	.17001	.17556	.18141
80.	.17108	.16970	.16932	.16994	.17154	.17408	.17747	.18162	.18640	.19166	.19724	.20298
90.	.18215	.18177	.18237	.18393	.18640	.18972	.19378	.19845	.20359	.20906	.21467	.22027
100.	.18722	.18794	.18963	.19224	.19569	.19986	.20465	.20989	.21544	.22112	.22676	.23219
110.	.18534	.18726	.19012	.19386	.19834	.20344	.20901	.21486	.22083	.22673	.23239	.23763
120.	.17573	.17891	.18299	.18789	.19345	.19951	.20587	.21235	.21875	.22488	.23054	.23557
130.	.15800	.16238	.16767	.17373	.18035	.18735	.19450	.20159	.20841	.21475	.22042	.22524
140.	.13207	.13760	.14403	.15116	.15877	.16665	.17454	.18220	.18941	.19594	.20160	.20622
150.	.09851	.10504	.11245	.12052	.12900	.13764	.14617	.15432	.16187	.16857	.17422	.17865
160.	.05849	.06581	.07399	.08279	.09194	.10117	.11019	.11874	.12654	.13336	.13900	.14329
170.	.01378	.02160	.03027	.03955	.04913	.05874	.06808	.07687	.08483	.09174	.09737	.10156
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927
10.	.01625	.02329	.03047	.03759	.04441	.05073	.05637	.06114	.06491	.06756	.06901	.06921
20.	.04678	.05376	.06087	.06789	.07459	.08079	.08629	.09093	.09456	.09707	.09839	.09848
30.	.07717	.08405	.09102	.09786	.10437	.11034	.11561	.12000	.12338	.12566	.12676	.12664
40.	.10698	.11371	.12048	.12706	.13328	.13893	.14385	.14789	.15092	.15286	.15363	.15323
50.	.13572	.14225	.14873	.15498	.16081	.16603	.17049	.17405	.17661	.17809	.17844	.17766
60.	.16278	.16903	.17516	.18098	.18630	.19097	.19485	.19782	.19978	.20069	.20050	.19923
70.	.18739	.19332	.19900	.20428	.20900	.21300	.21616	.21840	.21964	.21984	.21901	.21716
80.	.20869	.21422	.21938	.22402	.22800	.23120	.23352	.23490	.23528	.23466	.23306	.23052
90.	.22567	.23073	.23527	.23917	.24231	.24459	.24594	.24633	.24573	.24417	.24169	.23837
100.	.23724	.24176	.24561	.24869	.25088	.25213	.25239	.25167	.24998	.24737	.24393	.23975
110.	.24229	.24623	.24933	.25150	.25267	.25280	.25190	.24999	.24712	.24338	.23890	.23380
120.	.23982	.24315	.24546	.24669	.24679	.24577	.24365	.24050	.23641	.23151	.22595	.21989
130.	.22906	.23178	.23330	.23359	.23263	.23046	.22713	.22275	.21745	.21140	.20478	.19778
140.	.20964	.21178	.21256	.21197	.21001	.20675	.20229	.19676	.19033	.18320	.17558	.16771
150.	.18172	.18335	.18348	.18211	.17928	.17508	.16962	.16309	.15568	.14761	.13913	.13050
160.	.14609	.14731	.14693	.14496	.14144	.13650	.13028	.12296	.11478	.10598	.09683	.08760
170.	.10418	.10515	.10444	.10207	.09812	.09270	.08598	.07816	.06948	.06021	.05063	.04102
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464
10.	.06817	.06590	.06248	.05802	.05265	.04653	.03984	.03280	.02561	.01850	.01168	.00536
20.	.09733	.09498	.09150	.08700	.08161	.07550	.06885	.06187	.05476	.04775	.04104	.03484
30.	.12532	.12283	.11925	.11468	.10927	.10318	.09659	.08971	.08275	.07590	.06940	.06342
40.	.15166	.14896	.14523	.14058	.13514	.12908	.12259	.11586	.10910	.10251	.09629	.09064
50.	.17575	.17280	.16887	.16410	.15863	.15262	.14625	.13973	.13325	.12700	.12117	.11595
60.	.19692	.19363	.18946	.18455	.17904	.17310	.16691	.16065	.15452	.14871	.14338	.13871
70.	.21434	.21066	.20621	.20113	.19558	.18973	.18375	.17783	.17214	.16686	.16215	.15815
80.	.22713	.22298	.21820	.21294	.20736	.20162	.19591	.19038	.18522	.18058	.17660	.17340
90.	.23432	.22965	.22450	.21904	.21342	.20783	.20242	.19737	.19282	.18892	.18578	.18350
100.	.23496	.22972	.22417	.21849	.21285	.20743	.20237	.19785	.19400	.19093	.18873	.18748
110.	.22823	.22238	.21641	.21051	.20485	.19961	.19495	.19101	.18791	.18574	.18457	.18444
120.	.21353	.20705	.20065	.19452	.18886	.18383	.17958	.17625	.17394	.17271	.17261	.17363
130.	.19063	.18354	.17671	.17038	.16471	.15989	.15607	.15335	.15182	.15154	.15250	.15467
140.	.15982	.15215	.14494	.13841	.13275	.12814	.12471	.12257	.12179	.12239	.12435	.12761
150.	.12197	.11381	.10627	.09957	.09392	.08949	.08641	.08478	.08465	.08602	.08885	.09306
160.	.07858	.07003	.06223	.05541	.04977	.04548	.04268	.04146	.04184	.04381	.04733	.05227
170.	.03168	.02289	.01492	.00802	.00239	-.00180	-.00442	-.00539	-.00468	-.00231	.00164	.00706

ALPHA = 160.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406
10.	-.01020	-.01398	-.01663	-.01809	-.01829	-.01725	-.01498	-.01156	-.00709	-.00170	.00443	.01112
20.	.01435	.01069	.00815	.00681	.00672	.00787	.01023	.01373	.01826	.02368	.02984	.03653
30.	.03820	.03474	.03241	.03128	.03138	.03271	.03523	.03886	.04349	.04899	.05518	.06187
40.	.06098	.05782	.05578	.05495	.05533	.05691	.05966	.06348	.06826	.07385	.08009	.08678
50.	.08225	.07948	.07784	.07739	.07814	.08007	.08312	.08718	.09215	.09787	.10417	.11085
60.	.10147	.09920	.09807	.09811	.09933	.10168	.10510	.10947	.11468	.12055	.12691	.13357
70.	.11801	.11635	.11584	.11648	.11826	.12113	.12499	.12974	.13522	.14127	.14770	.15433
80.	.13117	.13023	.13044	.13179	.13423	.13770	.14208	.14725	.15305	.15930	.16581	.17239
90.	.14015	.14004	.14107	.14322	.14642	.15057	.15555	.16120	.16735	.17382	.18041	.18692
100.	.14413	.14494	.14690	.14994	.15398	.15888	.16451	.17068	.17722	.18392	.19058	.19699
110.	.14234	.14415	.14710	.15110	.15603	.16174	.16805	.17478	.18172	.18866	.19539	.20170
120.	.13416	.13700	.14098	.14597	.15182	.15836	.16539	.17268	.18003	.18721	.19399	.20018
130.	.11921	.12307	.12807	.13404	.14081	.14816	.15588	.16374	.17148	.17888	.18572	.19178
140.	.09749	.10232	.10827	.11515	.12277	.13089	.13926	.14763	.15574	.16334	.17022	.17614
150.	.06946	.07513	.08191	.08960	.09795	.10673	.11566	.12447	.13290	.14068	.14758	.15339
160.	.03611	.04244	.04986	.05817	.06711	.07640	.08577	.09492	.10359	.11150	.11842	.12414
170.	-.00109	.00565	.01350	.02221	.03152	.04114	.05078	.06016	.06898	.07697	.08390	.08956
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825
10.	.01817	.02537	.03250	.03933	.04567	.05132	.05610	.05988	.06253	.06399	.06419	.06315
20.	.04357	.05073	.05780	.06456	.07081	.07635	.08103	.08469	.08722	.08856	.08866	.08750
30.	.06887	.07596	.08293	.08955	.09564	.10101	.10549	.10895	.11128	.11241	.11231	.11099
40.	.09373	.10071	.10752	.11396	.11981	.12492	.12912	.13228	.13431	.13515	.13477	.13319
50.	.11772	.12456	.13116	.13733	.14287	.14763	.15145	.15422	.15585	.15630	.15555	.15362
60.	.14033	.14698	.15331	.15914	.16429	.16860	.17194	.17421	.17534	.17529	.17408	.17172
70.	.16095	.16735	.17335	.17876	.18341	.18718	.18993	.19159	.19210	.19146	.18968	.18682
80.	.17883	.18494	.19053	.19544	.19951	.20262	.20467	.20561	.20540	.20406	.20161	.19815
90.	.19314	.19890	.20402	.20834	.21173	.21409	.21534	.21545	.21441	.21226	.20906	.20491
100.	.20297	.20834	.21292	.21657	.21920	.22071	.22107	.22025	.21830	.21525	.21122	.20632
110.	.20740	.21232	.21631	.21925	.22105	.22165	.22103	.21923	.21628	.21228	.20735	.20164
120.	.20558	.21004	.21341	.21559	.21652	.21617	.21455	.21171	.20773	.20274	.19689	.19035
130.	.19687	.20086	.20361	.20504	.20510	.20381	.20119	.19732	.19232	.18635	.17958	.17223
140.	.18095	.18449	.18665	.18737	.18662	.18443	.18087	.17604	.17009	.16320	.15558	.14747
150.	.15794	.16108	.16272	.16282	.16136	.15839	.15401	.14834	.14156	.13388	.12552	.11674
160.	.12848	.13131	.13255	.13215	.13013	.12656	.12153	.11521	.10778	.09947	.09054	.08124
170.	.09376	.09639	.09736	.09665	.09427	.09031	.08487	.07812	.07027	.06156	.05226	.04263
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032
10.	.06088	.05746	.05299	.04760	.04147	.03478	.02773	.02053	.01340	.00657	.00023	-.00542
20.	.08514	.08165	.07712	.07169	.06554	.05884	.05181	.04465	.03758	.03082	.02457	.01902
30.	.10847	.10484	.10020	.09471	.08852	.08182	.07482	.06773	.06077	.05414	.04805	.04268
40.	.13044	.12662	.12184	.11625	.11001	.10332	.09637	.08939	.08258	.07614	.07028	.06518
50.	.15058	.14651	.14154	.13582	.12952	.12284	.11598	.10914	.10254	.09637	.09082	.08607
60.	.16831	.16393	.15873	.15285	.14649	.13983	.13307	.12643	.12009	.11426	.10912	.10481
70.	.18295	.17821	.17273	.16668	.16024	.15361	.14700	.14059	.13459	.12918	.12453	.12077
80.	.19376	.18859	.18279	.17654	.17003	.16345	.15701	.15090	.14531	.14041	.13634	.13323
90.	.19994	.19429	.18813	.18167	.17508	.16857	.16234	.15658	.15147	.14715	.14376	.14140
100.	.20069	.19452	.18798	.18128	.17462	.16820	.16222	.15686	.15228	.14862	.14600	.14448
110.	.19532	.18859	.18165	.17471	.16799	.16168	.15597	.15105	.14706	.14412	.14233	.14173
120.	.18332	.17603	.16868	.16150	.15472	.14853	.14313	.13867	.13530	.13312	.13219	.13254
130.	.16451	.15666	.14891	.14151	.13468	.12862	.12352	.11953	.11678	.11535	.11529	.11658
140.	.13910	.13073	.12262	.11501	.10814	.10221	.09740	.09387	.09171	.09099	.09174	.09392
150.	.10781	.09900	.09058	.08280	.07589	.07008	.06554	.06239	.06075	.06066	.06211	.06508
160.	.07188	.06272	.05406	.04615	.03922	.03351	.02917	.02634	.02510	.02550	.02751	.03109
170.	.03299	.02361	.01479	.00680	-.00013	-.00579	-.00999	-.01262	-.01359	-.01288	-.01050	-.00653

ALPHA = 170.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701
10.	-.01988	-.02254	-.02400	-.02421	-.02317	-.02091	-.01748	-.01301	-.00763	-.00149	.00521	.01228
20.	-.00114	-.00371	-.00508	-.00520	-.00407	-.00171	.00179	.00633	.01177	.01795	.02469	.03176
30.	.01703	.01461	.01340	.01344	.01474	.01724	.02088	.02554	.03109	.03734	.04412	.05122
40.	.03434	.03215	.03117	.03145	.03298	.03570	.03953	.04436	.05005	.05641	.06326	.07038
50.	.05046	.04857	.04791	.04850	.05033	.05334	.05743	.06248	.06835	.07484	.08177	.08892
60.	.06498	.06348	.06321	.06420	.06641	.06977	.07419	.07952	.08560	.09226	.09928	.10646
70.	.07743	.07640	.07662	.07809	.08076	.08455	.08934	.09500	.10135	.10819	.11532	.12252
80.	.08727	.08679	.08758	.08961	.09282	.09711	.10235	.10838	.11503	.12208	.12932	.13654
90.	.09388	.09405	.09549	.09816	.10198	.10684	.11258	.11904	.12601	.13329	.14065	.14787
100.	.09667	.09754	.09971	.10309	.10759	.11307	.11936	.12628	.13360	.14112	.14860	.15581
110.	.09504	.09668	.09962	.10377	.10899	.11513	.12201	.12940	.13710	.14487	.15246	.15965
120.	.08852	.09096	.09471	.09964	.10561	.11243	.11990	.12779	.13586	.14387	.15157	.15873
130.	.07684	.08007	.08462	.09032	.09703	.10452	.11257	.12094	.12937	.13761	.14541	.15252
140.	.06000	.06398	.06927	.07571	.08309	.09121	.09980	.10861	.11738	.12583	.13370	.14077
150.	.03837	.04300	.04894	.05601	.06399	.07265	.08171	.09090	.09995	.10858	.11652	.12354
160.	.01271	.01785	.02430	.03186	.04031	.04938	.05881	.06830	.07756	.08632	.09431	.10129
170.	-.01585	-.01038	-.00360	.00428	.01302	.02237	.03202	.04170	.05111	.05995	.06797	.07491
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601
10.	.01949	.02662	.03347	.03982	.04548	.05028	.05407	.05673	.05819	.05841	.05736	.05510
20.	.03897	.04609	.05291	.05921	.06481	.06953	.07324	.07582	.07718	.07730	.07617	.07382
30.	.05842	.06551	.07226	.07847	.08396	.08855	.09212	.09454	.09574	.09570	.09441	.09190
40.	.07757	.08459	.09125	.09733	.10265	.10706	.11041	.11260	.11357	.11329	.11177	.10905
50.	.09608	.10303	.10955	.11545	.12055	.12470	.12776	.12965	.13031	.12972	.12789	.12489
60.	.11358	.12041	.12676	.13243	.13724	.14106	.14376	.14527	.14553	.14454	.14233	.13897
70.	.12957	.13627	.14239	.14777	.15223	.15564	.15789	.15893	.15871	.15724	.15457	.15078
80.	.14351	.15002	.15588	.16090	.16493	.16786	.16958	.17006	.16927	.16724	.16403	.15974
90.	.15473	.16103	.16656	.17117	.17470	.17707	.17819	.17802	.17658	.17391	.17009	.16523
100.	.16254	.16858	.17375	.17788	.18086	.18260	.18303	.18215	.17999	.17661	.17211	.16663
110.	.16622	.17198	.17674	.18036	.18273	.18378	.18347	.18183	.17889	.17474	.16952	.16338
120.	.16513	.17057	.17490	.17798	.17971	.18004	.17897	.17653	.17278	.16785	.16189	.15506
130.	.15874	.16387	.16776	.17029	.17139	.17101	.16918	.16594	.16140	.15569	.14899	.14150
140.	.14681	.15164	.15512	.15713	.15762	.15657	.15402	.15004	.14475	.13831	.13092	.12281
150.	.12941	.13398	.13708	.13864	.13860	.13697	.13379	.12915	.12321	.11615	.10816	.09951
160.	.10704	.11139	.11420	.11540	.11494	.11285	.10917	.10403	.09758	.09002	.08158	.07250
170.	.08058	.08479	.08741	.08838	.08765	.08525	.08126	.07579	.06901	.06113	.05238	.04304
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513
10.	.05168	.04721	.04182	.03568	.02898	.02192	.01471	.00757	.00072	-.00563	-.01129	-.01609
20.	.07032	.06577	.06033	.05415	.04741	.04034	.03313	.02601	.01920	.01289	.00730	.00257
30.	.08827	.08360	.07806	.07180	.06502	.05792	.05072	.04364	.03689	.03067	.02519	.02059
40.	.10522	.10038	.09470	.08834	.08149	.07437	.06718	.06016	.05350	.04742	.04209	.03769
50.	.12079	.11574	.10987	.10338	.09645	.08930	.08214	.07519	.06867	.06277	.05767	.05352
60.	.13455	.12922	.12314	.11648	.10946	.10228	.09516	.08833	.08198	.07631	.07150	.06768
70.	.14598	.14032	.13398	.12714	.12001	.11280	.10575	.09906	.09293	.08756	.08310	.07969
80.	.15450	.14846	.14182	.13477	.12753	.12031	.11334	.10683	.10097	.09595	.09192	.08899
90.	.15949	.15303	.14606	.13878	.13142	.12420	.11734	.11104	.10551	.10090	.09736	.09500
100.	.16034	.15342	.14609	.13858	.13110	.12388	.11716	.11112	.10595	.10182	.09884	.09710
110.	.15650	.14911	.14141	.13364	.12605	.11886	.11229	.10653	.10177	.09815	.09578	.09473
120.	.14759	.13970	.13163	.12362	.11592	.10876	.10237	.09692	.09259	.08952	.08778	.08745
130.	.13344	.12507	.11664	.10840	.10061	.09349	.08727	.08214	.07825	.07572	.07463	.07500
140.	.11422	.10540	.09664	.08819	.08031	.07325	.06721	.06238	.05890	.05689	.05640	.05745
150.	.09045	.08126	.07221	.06358	.05564	.04862	.04274	.03818	.03507	.03352	.03356	.03519
160.	.06308	.05359	.04432	.03556	.02757	.02060	.01485	.01050	.00768	.00648	.00694	.00904
170.	.03338	.02371	.01430	.00546	-.00256	-.00951	-.01517	-.01938	-.02201	-.02297	-.02224	-.01984

ALPHA = 180.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020
10.	-.02901	-.03048	-.03070	-.02967	-.02741	-.02399	-.01952	-.01414	-.00800	-.00129	.00578	.01300
20.	-.01665	-.01806	-.01822	-.01712	-.01479	-.01131	-.00678	-.00133	.00486	.01162	.01872	.02597
30.	-.00471	-.00603	-.00607	-.00486	-.00241	.00119	.00584	.01139	.01767	.02450	.03167	.03896
40.	.00661	.00545	.00556	.00695	.00957	.01334	.01815	.02385	.03026	.03720	.04445	.05179
50.	.01709	.01614	.01647	.01809	.02094	.02493	.02995	.03584	.04242	.04949	.05684	.06424
60.	.02648	.02579	.02640	.02830	.03144	.03570	.04098	.04710	.05389	.06112	.06859	.07607
70.	.03447	.03409	.03504	.03729	.04076	.04536	.05095	.05734	.06436	.07179	.07939	.08695
80.	.04069	.04069	.04203	.04468	.04856	.05354	.05948	.06620	.07348	.08112	.08887	.09651
90.	.04476	.04519	.04699	.05010	.05442	.05984	.06618	.07324	.08082	.08869	.09660	.10432
100.	.04628	.04719	.04949	.05310	.05793	.06382	.07058	.07803	.08593	.09403	.10210	.10989
110.	.04486	.04630	.04913	.05329	.05865	.06503	.07226	.08010	.08832	.09668	.10491	.11276
120.	.04022	.04219	.04559	.05031	.05621	.06310	.07079	.07904	.08758	.09618	.10456	.11247
130.	.03218	.03469	.03863	.04391	.05034	.05773	.06587	.07451	.08337	.09220	.10072	.10867
140.	.02075	.02376	.02823	.03401	.04094	.04881	.05736	.06635	.07550	.08454	.09318	.10117
150.	.00619	.00964	.01456	.02079	.02815	.03642	.04533	.05463	.06403	.07324	.08198	.08999
160.	-.01100	-.00720	-.00192	.00466	.01236	.02094	.03013	.03967	.04925	.05859	.06741	.07543
170.	-.03004	-.02602	-.02051	-.01370	-.00578	.00300	.01237	.02206	.03176	.04119	.05005	.05808

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261
10.	.02014	.02700	.03337	.03904	.04385	.04765	.05033	.05180	.05202	.05099	.04873	.04532
20.	.03313	.03999	.04635	.05200	.05678	.06054	.06317	.06458	.06474	.06364	.06131	.05783
30.	.04614	.05300	.05933	.06495	.06966	.07335	.07588	.07720	.07724	.07603	.07358	.06998
40.	.05899	.06585	.07215	.07769	.08232	.08589	.08829	.08945	.08934	.08795	.08533	.08156
50.	.07148	.07832	.08456	.09002	.09452	.09793	.10015	.10111	.10077	.09916	.09631	.09231
60.	.08333	.09015	.09632	.10165	.10599	.10920	.11118	.11188	.11126	.10936	.10623	.10196
70.	.09423	.10101	.10708	.11225	.11639	.11934	.12104	.12141	.12047	.11822	.11474	.11014
80.	.10380	.11052	.11646	.12144	.12532	.12798	.12933	.12933	.12798	.12533	.12146	.11647
90.	.11160	.11824	.12402	.12878	.13236	.13466	.13561	.13518	.13339	.13028	.12595	.12054
100.	.11717	.12370	.12930	.13379	.13703	.13894	.13944	.13853	.13623	.13261	.12779	.12190
110.	.12001	.12642	.13180	.13600	.13887	.14034	.14036	.13893	.13609	.13193	.12658	.12019
120.	.11968	.12595	.13110	.13498	.13746	.13848	.13799	.13602	.13262	.12790	.12201	.11511
130.	.11582	.12195	.12686	.13042	.13251	.13307	.13208	.12957	.12562	.12035	.11392	.10652
140.	.10826	.11424	.11892	.12217	.12388	.12401	.12255	.11953	.11507	.10928	.10235	.09449
150.	.09702	.10287	.10735	.11032	.11170	.11145	.10957	.10611	.10120	.09496	.08760	.07934
160.	.08242	.08815	.09246	.09522	.09634	.09578	.09357	.08977	.08450	.07792	.07022	.06164
170.	.06503	.07069	.07489	.07750	.07844	.07769	.07526	.07124	.06573	.05892	.05100	.04222

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894
10.	.04085	.03546	.02932	.02261	.01554	.00833	.00118	-.00568	-.01204	-.01772	-.02253	-.02633
20.	.05330	.04785	.04165	.03490	.02780	.02055	.01339	.00653	.00017	-.00548	-.01026	-.01402
30.	.06533	.05978	.05350	.04667	.03950	.03221	.02503	.01817	.01184	.00623	.00151	-.00218
40.	.07675	.07105	.06464	.05770	.05045	.04311	.03591	.02905	.02275	.01720	.01258	.00901
50.	.08730	.08141	.07483	.06776	.06041	.05300	.04577	.03893	.03268	.02722	.02272	.01931
60.	.09668	.09056	.08378	.07654	.06907	.06159	.05434	.04752	.04135	.03601	.03167	.02847
70.	.10456	.09816	.09114	.08372	.07611	.06855	.06127	.05450	.04843	.04325	.03912	.03616
80.	.11054	.10382	.09653	.08890	.08114	.07351	.06622	.05950	.05356	.04857	.04469	.04204
90.	.11420	.10713	.09955	.09169	.08377	.07606	.06877	.06213	.05635	.05159	.04801	.04571
100.	.11513	.10769	.09979	.09168	.08361	.07582	.06855	.06202	.05642	.05193	.04868	.04678
110.	.11297	.10512	.09690	.08855	.08032	.07246	.06522	.05881	.05342	.04923	.04635	.04488
120.	.10742	.09918	.09063	.08203	.07365	.06574	.05854	.05227	.04711	.04323	.04075	.03974
130.	.09838	.08975	.08088	.07206	.06354	.05558	.04843	.04231	.03739	.03384	.03175	.03119
140.	.08593	.07694	.06779	.05876	.05012	.04213	.03504	.02906	.02437	.02112	.01941	.01928
150.	.07042	.06112	.05173	.04252	.03378	.02577	.01873	.01289	.00841	.00543	.00405	.00431
160.	.05244	.04291	.03333	.02398	.01517	.00715	.00016	-.00557	-.00989	-.01264	-.01376	-.01321
170.	.03285	.02316	.01346	.00403	-.00483	-.01286	-.01981	-.02547	-.02967	-.03228	-.03322	-.03247



ALPHA = 190.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734
10.	-.03732	-.03755	-.03653	-.03428	-.03087	-.02641	-.02103	-.01489	-.00819	-.00112	.00611	.01326
20.	-.03171	-.03192	-.03087	-.02858	-.02513	-.02062	-.01519	-.00901	-.00225	.00486	.01213	.01932
30.	-.02637	-.02653	-.02542	-.02307	-.01954	-.01495	-.00944	-.00317	.00367	.01086	.01820	.02543
40.	-.02138	-.02147	-.02027	-.01782	-.01418	-.00947	-.00384	.00255	.00950	.01680	.02423	.03156
50.	-.01684	-.01683	-.01551	-.01292	-.00914	-.00428	.00150	.00805	.01514	.02258	.03012	.03756
60.	-.01285	-.01272	-.01125	-.00850	-.00454	.00051	.00648	.01321	.02048	.02808	.03577	.04332
70.	-.00957	-.00928	-.00764	-.00468	-.00051	.00476	.01096	.01791	.02538	.03317	.04102	.04870
80.	-.00714	-.00667	-.00481	-.00162	.00280	.00832	.01478	.02197	.02967	.03767	.04570	.05352
90.	-.00573	-.00505	-.00295	.00050	.00520	.01101	.01774	.02520	.03316	.04138	.04960	.05758
100.	-.00551	-.00460	-.00223	.00151	.00651	.01262	.01966	.02741	.03563	.04408	.05250	.06063
110.	-.00665	-.00548	-.00283	.00122	.00654	.01297	.02033	.02837	.03687	.04556	.05417	.06246
120.	-.00926	-.00783	-.00488	-.00052	.00513	.01189	.01956	.02790	.03667	.04559	.05440	.06283
130.	-.01341	-.01171	-.00848	-.00381	.00216	.00924	.01721	.02585	.03487	.04402	.05300	.06156
140.	-.01907	-.01712	-.01362	-.00866	-.00240	.00497	.01323	.02212	.03138	.04073	.04988	.05854
150.	-.02612	-.02395	-.02020	-.01499	-.00848	-.00085	.00765	.01676	.02622	.03573	.04501	.05377
160.	-.03429	-.03195	-.02802	-.02261	-.01589	-.00807	.00062	.00991	.01952	.02916	.03853	.04736
170.	-.04324	-.04078	-.03672	-.03118	-.02433	-.01638	-.00758	.00183	.01153	.02125	.03069	.03955
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816
10.	.02013	.02650	.03218	.03701	.04082	.04351	.04500	.04524	.04421	.04197	.03856	.03410
20.	.02622	.03261	.03832	.04315	.04696	.04965	.05111	.05133	.05027	.04799	.04454	.04003
30.	.03239	.03883	.04455	.04939	.05320	.05586	.05729	.05746	.05634	.05399	.05046	.04587
40.	.03857	.04505	.05080	.05564	.05944	.06206	.06344	.06353	.06233	.05988	.05624	.05154
50.	.04465	.05118	.05696	.06181	.06557	.06815	.06945	.06944	.06813	.06554	.06176	.05690
60.	.05050	.05710	.06290	.06774	.07147	.07398	.07518	.07505	.07358	.07083	.06687	.06182
70.	.05598	.06264	.06847	.07330	.07698	.07939	.08047	.08018	.07854	.07558	.07141	.06614
80.	.06091	.06763	.07348	.07828	.08189	.08419	.08512	.08465	.08279	.07961	.07518	.06966
90.	.06507	.07185	.07771	.08247	.08599	.08816	.08892	.08824	.08614	.08269	.07798	.07218
100.	.06823	.07506	.08092	.08563	.08904	.09106	.09162	.09070	.08834	.08460	.07960	.07348
110.	.07015	.07703	.08288	.08752	.09081	.09266	.09300	.09183	.08918	.08513	.07981	.07338
120.	.07061	.07752	.08335	.08791	.09107	.09273	.09285	.09141	.08847	.08411	.07846	.07170
130.	.06942	.07636	.08215	.08662	.08965	.09112	.09101	.08931	.08608	.08141	.07544	.06836
140.	.06647	.07342	.07917	.08356	.08644	.08774	.08741	.08546	.08196	.07700	.07074	.06337
150.	.06175	.06870	.07441	.07871	.08147	.08261	.08209	.07992	.07617	.07096	.06445	.05683
160.	.05537	.06231	.06799	.07222	.07488	.07589	.07521	.07287	.06893	.06352	.05681	.04899
170.	.04758	.05452	.06016	.06434	.06693	.06785	.06706	.06460	.06054	.05500	.04816	.04021
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163
10.	.02872	.02258	.01587	.00880	.00158	-.00558	-.01244	-.01882	-.02450	-.02932	-.03314	-.03583
20.	.03460	.02841	.02166	.01454	.00728	.00008	-.00681	-.01321	-.01891	-.02374	-.02756	-.03024
30.	.04036	.03409	.02725	.02006	.01273	.00548	-.00147	-.00790	-.01363	-.01847	-.02228	-.02494
40.	.04590	.03952	.03257	.02526	.01784	.01050	.00349	-.00299	-.00874	-.01358	-.01737	-.02000
50.	.05111	.04457	.03747	.03004	.02249	.01506	.00797	.00143	-.00434	-.00919	-.01296	-.01553
60.	.05585	.04912	.04185	.03425	.02656	.01901	.01183	.00523	-.00057	-.00542	-.00915	-.01165
70.	.05994	.05299	.04552	.03773	.02988	.02220	.01492	.00826	.00243	-.00240	-.00607	-.00849
80.	.06321	.05602	.04831	.04032	.03229	.02446	.01707	.01035	.00451	-.00030	-.00390	-.00621
90.	.06544	.05798	.05002	.04181	.03359	.02561	.01812	.01134	.00548	.00072	-.00280	-.00497
100.	.06645	.05870	.05047	.04202	.03361	.02548	.01788	.01105	.00519	.00048	-.00294	-.00496
110.	.06602	.05798	.04948	.04079	.03218	.02390	.01620	.00932	.00348	-.00117	-.00446	-.00631
120.	.06403	.05569	.04692	.03800	.02919	.02076	.01298	.00607	.00024	-.00432	-.00748	-.00915
130.	.06039	.05175	.04273	.03358	.02460	.01604	.00818	.00124	-.00455	-.00902	-.01205	-.01352
140.	.05511	.04621	.03695	.02761	.01846	.00979	.00187	-.00508	-.01083	-.01522	-.01811	-.01940
150.	.04833	.03921	.02975	.02024	.01096	.00220	-.00578	-.01273	-.01844	-.02274	-.02550	-.02664
160.	.04030	.03101	.02140	.01176	.00238	-.00644	-.01445	-.02140	-.02707	-.03131	-.03397	-.03497
170.	.03140	.02200	.01229	.00257	-.00686	-.01573	-.02375	-.03069	-.03634	-.04052	-.04311	-.04402

ALPHA = 200.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419
10.	-.04456	-.04355	-.04131	-.03792	-.03347	-.02809	-.02196	-.01526	-.00819	-.00097	.00618	.01306
20.	-.04587	-.04487	-.04264	-.03923	-.03477	-.02937	-.02321	-.01648	-.00937	-.00210	.00510	.01202
30.	-.04728	-.04629	-.04405	-.04063	-.03614	-.03070	-.02449	-.01769	-.01051	-.00317	.00411	.01110
40.	-.04877	-.04779	-.04554	-.04210	-.03755	-.03206	-.02577	-.01889	-.01161	-.00417	.00321	.01032
50.	-.05030	-.04933	-.04707	-.04359	-.03899	-.03342	-.02704	-.02004	-.01265	-.00507	.00244	.00968
60.	-.05184	-.05088	-.04861	-.04508	-.04042	-.03475	-.02825	-.02113	-.01359	-.00586	.00182	.00921
70.	-.05335	-.05240	-.05011	-.04654	-.04179	-.03602	-.02939	-.02211	-.01440	-.00650	.00136	.00894
80.	-.05477	-.05384	-.05153	-.04790	-.04307	-.03717	-.03040	-.02296	-.01506	-.00696	.00110	.00888
90.	-.05605	-.05514	-.05281	-.04912	-.04419	-.03817	-.03124	-.02362	-.01552	-.00721	.00107	.00907
100.	-.05713	-.05624	-.05388	-.05014	-.04511	-.03896	-.03186	-.02405	-.01575	-.00721	.00130	.00952
110.	-.05794	-.05707	-.05469	-.05088	-.04576	-.03947	-.03221	-.02421	-.01570	-.00694	.00180	.01026
120.	-.05843	-.05758	-.05518	-.05131	-.04608	-.03967	-.03225	-.02406	-.01534	-.00636	.00261	.01129
130.	-.05854	-.05771	-.05529	-.05136	-.04605	-.03950	-.03193	-.02356	-.01465	-.00547	.00372	.01261
140.	-.05826	-.05743	-.05499	-.05101	-.04562	-.03896	-.03125	-.02273	-.01364	-.00427	.00510	.01419
150.	-.05756	-.05674	-.05428	-.05026	-.04479	-.03804	-.03021	-.02155	-.01232	-.00279	.00674	.01598
160.	-.05647	-.05566	-.05318	-.04912	-.04359	-.03676	-.02885	-.02008	-.01074	-.00109	.00856	.01792
170.	-.05504	-.05422	-.05173	-.04763	-.04206	-.03519	-.02721	-.01838	-.00897	.00075	.01047	.01991
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279
10.	.01944	.02513	.02996	.03379	.03649	.03799	.03824	.03724	.03500	.03160	.02715	.02178
20.	.01845	.02419	.02906	.03292	.03566	.03718	.03745	.03645	.03422	.03081	.02635	.02095
30.	.01760	.02341	.02835	.03227	.03506	.03661	.03690	.03591	.03368	.03026	.02576	.02032
40.	.01692	.02283	.02785	.03185	.03469	.03630	.03661	.03564	.03339	.02994	.02540	.01990
50.	.01641	.02244	.02757	.03167	.03459	.03625	.03660	.03563	.03337	.02989	.02529	.01972
60.	.01610	.02227	.02754	.03174	.03475	.03648	.03687	.03591	.03364	.03011	.02544	.01978
70.	.01600	.02234	.02775	.03208	.03520	.03700	.03744	.03649	.03420	.03063	.02588	.02011
80.	.01614	.02266	.02824	.03271	.03594	.03783	.03832	.03739	.03508	.03145	.02661	.02072
90.	.01654	.02326	.02901	.03364	.03699	.03897	.03951	.03860	.03627	.03258	.02765	.02163
100.	.01721	.02414	.03008	.03487	.03835	.04043	.04103	.04013	.03778	.03403	.02900	.02285
110.	.01818	.02531	.03144	.03639	.04001	.04218	.04284	.04197	.03959	.03578	.03065	.02437
120.	.01943	.02677	.03309	.03820	.04194	.04421	.04492	.04407	.04167	.03780	.03258	.02616
130.	.02095	.02848	.03498	.04024	.04410	.04646	.04723	.04639	.04397	.04004	.03473	.02819
140.	.02271	.03042	.03707	.04246	.04643	.04886	.04968	.04885	.04642	.04244	.03704	.03038
150.	.02466	.03250	.03928	.04478	.04884	.05133	.05218	.05137	.04891	.04489	.03941	.03266
160.	.02671	.03466	.04152	.04710	.05122	.05376	.05464	.05382	.05135	.04728	.04175	.03493
170.	.02876	.03677	.04370	.04932	.05347	.05603	.05691	.05609	.05360	.04950	.04393	.03706
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312
10.	.01565	.00895	.00188	-.00534	-.01250	-.01937	-.02575	-.03144	-.03627	-.04010	-.04281	-.04431
20.	.01479	.00806	.00095	-.00632	-.01352	-.02044	-.02687	-.03260	-.03748	-.04134	-.04408	-.04560
30.	.01411	.00731	.00013	-.00721	-.01449	-.02148	-.02798	-.03379	-.03873	-.04265	-.04543	-.04699
40.	.01362	.00673	-.00054	-.00798	-.01537	-.02247	-.02907	-.03498	-.04001	-.04400	-.04685	-.04845
50.	.01333	.00634	-.00106	-.00863	-.01615	-.02338	-.03011	-.03614	-.04128	-.04537	-.04829	-.04995
60.	.01328	.00615	-.00139	-.00911	-.01679	-.02418	-.03107	-.03724	-.04251	-.04671	-.04972	-.05145
70.	.01348	.00620	-.00151	-.00941	-.01727	-.02485	-.03191	-.03825	-.04366	-.04799	-.05111	-.05291
80.	.01395	.00650	-.00139	-.00949	-.01756	-.02534	-.03260	-.03911	-.04470	-.04917	-.05240	-.05428
90.	.01470	.00708	-.00102	-.00933	-.01761	-.02561	-.03308	-.03980	-.04555	-.05018	-.05353	-.05551
100.	.01576	.00794	-.00036	-.00889	-.01740	-.02563	-.03332	-.04024	-.04619	-.05098	-.05446	-.05653
110.	.01711	.00910	.00059	-.00817	-.01691	-.02537	-.03328	-.04041	-.04655	-.05150	-.05511	-.05728
120.	.01874	.01055	.00183	-.00715	-.01612	-.02480	-.03293	-.04027	-.04659	-.05170	-.05545	-.05771
130.	.02062	.01225	.00333	-.00585	-.01503	-.02393	-.03227	-.03980	-.04630	-.05156	-.05542	-.05777
140.	.02267	.01415	.00506	-.00431	-.01368	-.02277	-.03129	-.03899	-.04564	-.05104	-.05501	-.05744
150.	.02484	.01618	.00695	-.00258	-.01211	-.02135	-.03003	-.03788	-.04465	-.05015	-.05421	-.05671
160.	.02701	.01825	.00890	-.00074	-.01039	-.01975	-.02854	-.03649	-.04336	-.04894	-.05306	-.05560
170.	.02908	.02025	.01084	.00112	-.00860	-.01804	-.02689	-.03491	-.04183	-.04745	-.05160	-.05416

ALPHA = 210.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056
10.	-.05050	-.04828	-.04490	-.04046	-.03510	-.02898	-.02229	-.01523	-.00801	-.00086	.00601	.01239
20.	-.05870	-.05652	-.05317	-.04876	-.04341	-.03729	-.03059	-.02351	-.01626	-.00906	-.00214	.00430
30.	-.06681	-.06470	-.06141	-.05703	-.05170	-.04558	-.03886	-.03174	-.02443	-.01717	-.01017	-.00364
40.	-.07473	-.07271	-.06948	-.06515	-.05984	-.05372	-.04697	-.03980	-.03243	-.02507	-.01795	-.01130
50.	-.08228	-.08038	-.07725	-.07298	-.06771	-.06159	-.05481	-.04757	-.04010	-.03262	-.02536	-.01854
60.	-.08929	-.08754	-.08453	-.08034	-.07511	-.06899	-.06218	-.05487	-.04729	-.03967	-.03224	-.02522
70.	-.09553	-.09396	-.09110	-.08701	-.08184	-.07574	-.06889	-.06150	-.05379	-.04601	-.03838	-.03114
80.	-.10075	-.09940	-.09670	-.09275	-.08765	-.08157	-.07468	-.06721	-.05937	-.05140	-.04355	-.03606
90.	-.10468	-.10357	-.10107	-.09726	-.09226	-.08621	-.07930	-.07174	-.06375	-.05560	-.04751	-.03973
100.	-.10700	-.10617	-.10389	-.10025	-.09536	-.08935	-.08242	-.07478	-.06665	-.05829	-.04995	-.04188
110.	-.10745	-.10691	-.10488	-.10142	-.09665	-.09070	-.08377	-.07605	-.06778	-.05921	-.05061	-.04224
120.	-.10579	-.10554	-.10377	-.10051	-.09587	-.08999	-.08305	-.07526	-.06686	-.05809	-.04924	-.04056
130.	-.10185	-.10190	-.10038	-.09731	-.09281	-.08701	-.08007	-.07222	-.06369	-.05474	-.04565	-.03668
140.	-.09561	-.09594	-.09464	-.09176	-.08739	-.08166	-.07474	-.06683	-.05820	-.04908	-.03977	-.03055
150.	-.08718	-.08774	-.08665	-.08393	-.07967	-.07400	-.06709	-.05915	-.05042	-.04117	-.03168	-.02223
160.	-.07685	-.07760	-.07665	-.07406	-.06988	-.06426	-.05736	-.04939	-.04059	-.03124	-.02161	-.01200
170.	-.06509	-.06594	-.06509	-.06256	-.05844	-.05284	-.04594	-.03796	-.02912	-.01970	-.00998	-.00027

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667
10.	.01809	.02293	.02677	.02948	.03099	.03126	.03026	.02804	.02466	.02022	.01486	.00874
20.	.01005	.01496	.01886	.02164	.02321	.02353	.02259	.02041	.01706	.01265	.00730	.00119
30.	.00222	.00723	.01124	.01412	.01579	.01620	.01534	.01323	.00993	.00555	.00022	-.00590
40.	-.00530	-.00015	.00400	.00703	.00884	.00938	.00862	.00660	.00338	-.00095	-.00626	-.01238
50.	-.01237	-.00704	-.00270	.00051	.00250	.00320	.00259	.00069	-.00244	-.00671	-.01198	-.01810
60.	-.01884	-.01328	-.00871	-.00527	-.00307	-.00217	-.00261	-.00436	-.00737	-.01155	-.01678	-.02290
70.	-.02450	-.01868	-.01384	-.01014	-.00768	-.00655	-.00676	-.00833	-.01120	-.01528	-.02045	-.02656
80.	-.02914	-.02302	-.01788	-.01387	-.01112	-.00970	-.00967	-.01103	-.01372	-.01768	-.02278	-.02886
90.	-.03251	-.02606	-.02057	-.01622	-.01314	-.01141	-.01110	-.01221	-.01470	-.01851	-.02352	-.02957
100.	-.03433	-.02752	-.02167	-.01695	-.01350	-.01143	-.01081	-.01165	-.01392	-.01756	-.02246	-.02846
110.	-.03434	-.02717	-.02093	-.01582	-.01199	-.00956	-.00861	-.00915	-.01118	-.01464	-.01941	-.02535
120.	-.03232	-.02478	-.01815	-.01265	-.00843	-.00563	-.00434	-.00458	-.00636	-.00962	-.01426	-.02014
130.	-.02812	-.02022	-.01322	-.00733	-.00274	-.00042	.00205	.00211	.00058	-.00248	-.00699	-.01279
140.	-.02168	-.01346	-.00611	.00012	.00506	.00856	.01050	.01082	.00953	.00665	.00228	-.00346
150.	-.01312	-.00462	.00302	.00955	.01479	.01856	.02077	.02133	.02023	.01752	.01326	.00759
160.	-.00269	.00602	.01387	.02063	.02609	.03008	.03248	.03322	.03228	.02968	.02551	.01989
170.	.00915	.01799	.02598	.03287	.03847	.04259	.04511	.04596	.04511	.04258	.03846	.03286

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335
10.	.00205	-.00501	-.01223	-.01938	-.02625	-.03263	-.03833	-.04317	-.04701	-.04972	-.05123	-.05150
20.	-.00552	-.01260	-.01985	-.02704	-.03396	-.04040	-.04616	-.05107	-.05497	-.05775	-.05932	-.05964
30.	-.01262	-.01974	-.02704	-.03431	-.04131	-.04784	-.05370	-.05870	-.06271	-.06559	-.06727	-.06768
40.	-.01913	-.02630	-.03368	-.04103	-.04815	-.05481	-.06080	-.06595	-.07011	-.07313	-.07494	-.07548
50.	-.02489	-.03212	-.03959	-.04707	-.05433	-.06115	-.06732	-.07265	-.07699	-.08021	-.08219	-.08289
60.	-.02971	-.03702	-.04460	-.05223	-.05966	-.06667	-.07305	-.07862	-.08318	-.08662	-.08882	-.08972
70.	-.03341	-.04080	-.04850	-.05629	-.06392	-.07116	-.07779	-.08362	-.08845	-.09215	-.09461	-.09575
80.	-.03574	-.04322	-.05106	-.05902	-.06687	-.07437	-.08128	-.08740	-.09255	-.09656	-.09931	-.10072
90.	-.03648	-.04404	-.05202	-.06018	-.06827	-.07604	-.08327	-.08972	-.09520	-.09955	-.10264	-.10436
100.	-.03539	-.04303	-.05116	-.05952	-.06786	-.07593	-.08349	-.09029	-.09615	-.10087	-.10431	-.10638
110.	-.03229	-.04001	-.04828	-.05685	-.06545	-.07382	-.08172	-.08889	-.09513	-.10024	-.10407	-.10650
120.	-.02708	-.03487	-.04327	-.05203	-.06089	-.06956	-.07780	-.08535	-.09197	-.09748	-.10169	-.10449
130.	-.01973	-.02758	-.03611	-.04505	-.05415	-.06311	-.07168	-.07958	-.08658	-.09247	-.09706	-.10022
140.	-.01038	-.01828	-.02692	-.03603	-.04534	-.05457	-.06343	-.07166	-.07900	-.08524	-.09018	-.09367
150.	.00068	-.00726	-.01599	-.02524	-.03474	-.04418	-.05330	-.06180	-.06943	-.07597	-.08120	-.08498
160.	.01299	.00502	-.00378	-.01313	-.02276	-.03238	-.04168	-.05039	-.05825	-.06500	-.07046	-.07445
170.	.02597	.01798	.00914	-.00028	-.01000	-.01971	-.02913	-.03797	-.04596	-.05285	-.05845	-.06257

ALPHA = 220.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623
10.	-.05497	-.05161	-.04718	-.04184	-.03573	-.02905	-.02200	-.01480	-.00765	-.00078	.00559	.01129
20.	-.06980	-.06651	-.06215	-.05686	-.05079	-.04414	-.03710	-.02988	-.02271	-.01581	-.00938	-.00362
30.	-.08437	-.08120	-.07695	-.07174	-.06574	-.05913	-.05210	-.04488	-.03767	-.03071	-.02419	-.01833
40.	-.09846	-.09547	-.09136	-.08628	-.08037	-.07381	-.06681	-.05957	-.05231	-.04526	-.03863	-.03262
50.	-.11180	-.10903	-.10513	-.10020	-.09442	-.08794	-.08096	-.07371	-.06639	-.05923	-.05245	-.04626
60.	-.12406	-.12157	-.11791	-.11320	-.10756	-.10119	-.09426	-.08699	-.07960	-.07232	-.06536	-.05894
70.	-.13484	-.13270	-.12934	-.12488	-.11944	-.11319	-.10633	-.09905	-.09158	-.08415	-.07699	-.07030
80.	-.14369	-.14196	-.13896	-.13480	-.12960	-.12351	-.11672	-.10945	-.10190	-.09431	-.08691	-.07993
90.	-.15013	-.14885	-.14627	-.14246	-.13753	-.13164	-.12496	-.11769	-.11007	-.10231	-.09465	-.08734
100.	-.15362	-.15286	-.15074	-.14732	-.14271	-.13704	-.13048	-.12324	-.11554	-.10761	-.09969	-.09201
110.	-.15368	-.15348	-.15186	-.14887	-.14460	-.13917	-.13276	-.12556	-.11779	-.10968	-.10148	-.09344
120.	-.14990	-.15027	-.14917	-.14663	-.14271	-.13755	-.13130	-.12415	-.11632	-.10804	-.09957	-.09116
130.	-.14202	-.14296	-.14237	-.14027	-.13672	-.13183	-.12574	-.11865	-.11076	-.10232	-.09359	-.08483
140.	-.13000	-.13147	-.13136	-.12967	-.12646	-.12182	-.11590	-.10886	-.10094	-.09236	-.08339	-.07430
150.	-.11408	-.11601	-.11631	-.11499	-.11207	-.10765	-.10187	-.09489	-.08693	-.07824	-.06907	-.05971
160.	-.09483	-.09710	-.09772	-.09667	-.09398	-.08974	-.08406	-.07713	-.06915	-.06036	-.05104	-.04147
170.	-.07308	-.07556	-.07638	-.07550	-.07295	-.06881	-.06320	-.05629	-.04830	-.03946	-.03005	-.02035

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998
10.	.01613	.01997	.02270	.02422	.02449	.02351	.02130	.01793	.01351	.00817	.00206	-.00462
20.	.00129	.00522	.00803	.00964	.01000	.00911	.00698	.00369	-.00066	-.00596	-.01202	-.01868
30.	-.01329	-.00923	-.00628	-.00452	-.00401	-.00476	-.00992	-.02092	-.03147	-.04193	-.05238	-.06319
40.	-.02742	-.02317	-.02002	-.01805	-.01733	-.01788	-.01968	-.02268	-.02678	-.03186	-.03777	-.04433
50.	-.04083	-.03635	-.03294	-.03070	-.02971	-.03000	-.03155	-.03432	-.03822	-.04315	-.04893	-.05541
60.	-.05325	-.04847	-.04473	-.04217	-.04084	-.04080	-.04204	-.04452	-.04818	-.05290	-.05853	-.06491
70.	-.06430	-.05917	-.05505	-.05209	-.05036	-.04992	-.05079	-.05293	-.05628	-.06075	-.06619	-.07243
80.	-.07357	-.06803	-.06348	-.06005	-.05786	-.05696	-.05738	-.05912	-.06211	-.06628	-.07148	-.07757
90.	-.08058	-.07459	-.06954	-.06560	-.06287	-.06145	-.06137	-.06265	-.06523	-.06904	-.07397	-.07986
100.	-.08483	-.07835	-.07276	-.06825	-.06494	-.06294	-.06231	-.06306	-.06518	-.06860	-.07322	-.07889
110.	-.08581	-.07881	-.07265	-.06754	-.06361	-.06099	-.05977	-.05997	-.06159	-.06458	-.06885	-.07428
120.	-.08307	-.07554	-.06881	-.06308	-.05852	-.05527	-.05343	-.05305	-.05416	-.05670	-.06061	-.06577
130.	-.07630	-.06826	-.06097	-.05463	-.04945	-.04558	-.04313	-.04219	-.04278	-.04488	-.04843	-.05333
140.	-.06537	-.05687	-.04905	-.04216	-.03640	-.03195	-.02895	-.02748	-.02759	-.02927	-.03248	-.03712
150.	-.05043	-.04153	-.03327	-.02590	-.01965	-.01470	-.01122	-.00929	-.00899	-.01031	-.01323	-.01765
160.	-.03194	-.02273	-.01413	-.00640	.00023	.00556	.00942	.01169	.01231	.01126	.00857	.00432
170.	-.01065	-.00126	.00756	.01551	.02238	.02793	.03202	.03451	.03533	.03445	.03190	.02776

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234
10.	-.01167	-.01888	-.02602	-.03289	-.03927	-.04496	-.04981	-.05365	-.05637	-.05789	-.05816	-.05718
20.	-.02572	-.03293	-.04010	-.04700	-.05343	-.05919	-.06411	-.06803	-.07084	-.07245	-.07282	-.07192
30.	-.03902	-.04624	-.05345	-.06041	-.06693	-.07279	-.07783	-.08189	-.08484	-.08660	-.08711	-.08636
40.	-.05134	-.05858	-.06583	-.07288	-.07951	-.08552	-.09073	-.09497	-.09812	-.10009	-.10081	-.10026
50.	-.06239	-.06964	-.07696	-.08412	-.09090	-.09709	-.10252	-.10700	-.11041	-.11265	-.11364	-.11335
60.	-.07184	-.07911	-.08650	-.09378	-.10074	-.10716	-.11285	-.11763	-.12136	-.12393	-.12526	-.12530
70.	-.07930	-.08658	-.09405	-.10147	-.10864	-.11533	-.12133	-.12646	-.13057	-.13354	-.13527	-.13570
80.	-.08435	-.09163	-.09918	-.10676	-.11416	-.12115	-.12751	-.13305	-.13760	-.14102	-.14322	-.14412
90.	-.08654	-.09381	-.10143	-.10919	-.11685	-.12416	-.13092	-.13691	-.14196	-.14590	-.14863	-.15005
100.	-.08544	-.09268	-.10039	-.10832	-.11624	-.12391	-.13110	-.13758	-.14317	-.14768	-.15099	-.15299
110.	-.08068	-.08788	-.09566	-.10377	-.11197	-.12000	-.12764	-.13464	-.14079	-.14591	-.14984	-.15245
120.	-.07202	-.07917	-.08701	-.09529	-.10376	-.11217	-.12026	-.12778	-.13452	-.14025	-.14481	-.14806
130.	-.05941	-.06650	-.07439	-.08283	-.09156	-.10033	-.10885	-.11689	-.12418	-.13052	-.13570	-.13957
140.	-.04305	-.05008	-.05801	-.06659	-.07556	-.08464	-.09358	-.10208	-.10989	-.11679	-.12254	-.12699
150.	-.02343	-.03041	-.03837	-.04706	-.05623	-.06559	-.07487	-.08377	-.09203	-.09940	-.10565	-.11060
160.	-.00135	-.00828	-.01626	-.02505	-.03437	-.04394	-.05347	-.06268	-.07128	-.07901	-.08564	-.09097
170.	.02215	.01524	.00725	-.00159	-.01100	-.02071	-.03040	-.03980	-.04861	-.05657	-.06343	-.06899

ALPHA = 230.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105
10.	-.05784	-.05343	-.04810	-.04201	-.03534	-.02831	-.02111	-.01398	-.00712	-.00075	.00494	.00978
20.	-.07884	-.07453	-.06930	-.06329	-.05669	-.04970	-.04254	-.03541	-.02855	-.02214	-.01640	-.01149
30.	-.09942	-.09529	-.09021	-.08434	-.07785	-.07094	-.06382	-.05671	-.04983	-.04337	-.03754	-.03252
40.	-.11926	-.11538	-.11052	-.10484	-.09851	-.09171	-.08467	-.07758	-.07066	-.06414	-.05819	-.05301
50.	-.13797	-.13442	-.12986	-.12443	-.11830	-.11166	-.10471	-.09765	-.09071	-.08409	-.07800	-.07262
60.	-.15510	-.15195	-.14776	-.14266	-.13679	-.13035	-.12352	-.11651	-.10954	-.10281	-.09654	-.09090
70.	-.17008	-.16743	-.16369	-.15898	-.15344	-.14724	-.14057	-.13363	-.12663	-.11978	-.11329	-.10737
80.	-.18228	-.18022	-.17702	-.17278	-.16763	-.16172	-.15525	-.14839	-.14136	-.13438	-.12766	-.12140
90.	-.19102	-.18962	-.18704	-.18334	-.17864	-.17308	-.16684	-.16009	-.15305	-.14593	-.13895	-.13231
100.	-.19556	-.19491	-.19301	-.18992	-.18573	-.18056	-.17458	-.16797	-.16092	-.15366	-.14640	-.13936
110.	-.19522	-.19537	-.19421	-.19177	-.18813	-.18340	-.17772	-.17126	-.16422	-.15681	-.14926	-.14180
120.	-.18942	-.19041	-.19002	-.18826	-.18520	-.18091	-.17555	-.16925	-.16223	-.15468	-.14685	-.13896
130.	-.17782	-.17963	-.18000	-.17892	-.17643	-.17260	-.16755	-.16143	-.15443	-.14676	-.13865	-.13035
140.	-.16038	-.16295	-.16403	-.16359	-.16164	-.15823	-.15348	-.14753	-.14056	-.13278	-.12442	-.11575
150.	-.13745	-.14068	-.14238	-.14248	-.14100	-.13797	-.13349	-.12768	-.12074	-.11287	-.10430	-.09530
160.	-.10984	-.11358	-.11575	-.11628	-.11515	-.11241	-.10813	-.10244	-.09552	-.08758	-.07886	-.06962
170.	-.07876	-.08281	-.08528	-.08607	-.08517	-.08261	-.07845	-.07284	-.06594	-.05795	-.04913	-.03973

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292
10.	.01362	.01635	.01787	.01816	.01718	.01499	.01163	.00722	.00189	-.00420	-.01087	-.01790
20.	-.00757	-.00475	-.00311	-.00272	-.00357	-.00565	-.00889	-.01320	-.01843	-.02444	-.03104	-.03803
30.	-.02846	-.02548	-.02367	-.02308	-.02375	-.02563	-.02869	-.03282	-.03790	-.04377	-.05026	-.05717
40.	-.04875	-.04555	-.04349	-.04264	-.04303	-.04465	-.04744	-.05132	-.05617	-.06186	-.06819	-.07498
50.	-.06811	-.06461	-.06222	-.06103	-.06107	-.06232	-.06477	-.06832	-.07288	-.07831	-.08444	-.09108
60.	-.08608	-.08222	-.07944	-.07782	-.07741	-.07822	-.08023	-.08338	-.08757	-.09267	-.09853	-.10498
70.	-.10218	-.09789	-.09462	-.09249	-.09154	-.09181	-.09330	-.09595	-.09968	-.10439	-.10993	-.11613
80.	-.11579	-.11100	-.10717	-.10443	-.10286	-.10250	-.10337	-.10543	-.10863	-.11287	-.11803	-.12393
90.	-.12622	-.12087	-.11642	-.11300	-.11071	-.10963	-.10979	-.11119	-.11377	-.11747	-.12217	-.12773
100.	-.13276	-.12679	-.12164	-.11747	-.11440	-.11253	-.11191	-.11255	-.11445	-.11755	-.12174	-.12690
110.	-.13465	-.12804	-.12216	-.11719	-.11328	-.11055	-.10909	-.10894	-.11010	-.11253	-.11617	-.12091
120.	-.13127	-.12399	-.11736	-.11157	-.10680	-.10319	-.10086	-.09988	-.10027	-.10202	-.10509	-.10937
130.	-.12212	-.11420	-.10683	-.10023	-.09462	-.09015	-.08696	-.08516	-.08479	-.08586	-.08836	-.09218
140.	-.10702	-.09850	-.09045	-.08311	-.07670	-.07143	-.06745	-.06488	-.06380	-.06424	-.06619	-.06960
150.	-.08615	-.07712	-.06848	-.06050	-.05342	-.04745	-.04278	-.03955	-.03786	-.03775	-.03924	-.04227
160.	-.06014	-.05071	-.04163	-.03315	-.02555	-.01905	-.01386	-.01012	-.00795	-.00742	-.00854	-.01129
170.	-.03005	-.02038	-.01102	-.00224	-.00569	-.01251	-.01804	-.02210	-.02456	-.02535	-.02445	-.02189

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010
10.	-.02510	-.03223	-.03909	-.04546	-.05115	-.05599	-.05983	-.06256	-.06408	-.06436	-.06339	-.06119
20.	-.04319	-.05232	-.05919	-.06559	-.07133	-.07624	-.08016	-.08299	-.08462	-.08501	-.08416	-.08208
30.	-.06428	-.07139	-.07828	-.08474	-.09056	-.09559	-.09965	-.10263	-.10444	-.10502	-.10436	-.10247
40.	-.08203	-.08912	-.09603	-.10256	-.10851	-.11369	-.11794	-.12115	-.12321	-.12406	-.12367	-.12205
50.	-.09803	-.10509	-.11203	-.11865	-.12474	-.13013	-.13464	-.13813	-.14052	-.14171	-.14168	-.14042
60.	-.11181	-.11881	-.12579	-.13251	-.13879	-.14442	-.14924	-.15310	-.15588	-.15751	-.15792	-.15711
70.	-.12280	-.12974	-.13675	-.14359	-.15008	-.15601	-.16119	-.16549	-.16875	-.17089	-.17184	-.17156
80.	-.13041	-.13726	-.14429	-.15127	-.15799	-.16425	-.16987	-.17466	-.17848	-.18122	-.18279	-.18315
90.	-.13398	-.14072	-.14776	-.15488	-.16187	-.16850	-.17459	-.17994	-.18440	-.18782	-.19010	-.19118
100.	-.13288	-.13950	-.14654	-.15381	-.16107	-.16811	-.17471	-.18067	-.18582	-.18999	-.19306	-.19494
110.	-.12659	-.13305	-.14009	-.14750	-.15505	-.16251	-.16965	-.17627	-.18215	-.18712	-.19103	-.19375
120.	-.11474	-.12103	-.12806	-.13560	-.14343	-.15132	-.15902	-.16630	-.17293	-.17872	-.18349	-.18709
130.	-.09723	-.10335	-.11035	-.11802	-.12613	-.13443	-.14267	-.15059	-.15796	-.16455	-.17017	-.17464
140.	-.07434	-.08030	-.08727	-.09505	-.10341	-.11208	-.12081	-.12933	-.13738	-.14472	-.15113	-.15640
150.	-.04675	-.05255	-.05950	-.06737	-.07594	-.08493	-.09409	-.10312	-.11176	-.11974	-.12682	-.13278
160.	-.01557	-.02125	-.02817	-.03611	-.04484	-.05408	-.06356	-.07298	-.08207	-.09054	-.09814	-.10464
170.	.01774	.01212	.00522	-.00277	-.01159	-.02098	-.03066	-.04033	-.04970	-.05848	-.06640	-.07323

ALPHA = 240.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486
10.	-.05901	-.05369	-.04761	-.04096	-.03394	-.02676	-.01964	-.01279	-.00643	-.00075	.00408	.00792
20.	-.08554	-.08036	-.07440	-.06786	-.06093	-.05382	-.04675	-.03993	-.03357	-.02786	-.02298	-.01907
30.	-.11150	-.10654	-.10079	-.09443	-.08765	-.08066	-.07367	-.06689	-.06053	-.05478	-.04981	-.04579
40.	-.13648	-.13184	-.12638	-.12027	-.11371	-.10689	-.10001	-.09329	-.08693	-.08112	-.07604	-.07185
50.	-.16000	-.15577	-.15069	-.14493	-.13865	-.13205	-.12533	-.11869	-.11233	-.10645	-.10123	-.09682
60.	-.18146	-.17775	-.17316	-.16782	-.16191	-.15559	-.14907	-.14254	-.13619	-.13023	-.12483	-.12016
70.	-.20018	-.19710	-.19310	-.18829	-.18282	-.17686	-.17058	-.16419	-.15786	-.15181	-.14620	-.14121
80.	-.21535	-.21303	-.20972	-.20553	-.20059	-.19505	-.18908	-.18285	-.17656	-.17040	-.16456	-.15921
90.	-.22611	-.22464	-.22213	-.21866	-.21433	-.20928	-.20366	-.19764	-.19140	-.18513	-.17903	-.17328
100.	-.23155	-.23103	-.22941	-.22674	-.22310	-.21860	-.21338	-.20759	-.20142	-.19504	-.18866	-.18247
110.	-.23080	-.23131	-.23065	-.22884	-.22594	-.22204	-.21726	-.21174	-.20564	-.19916	-.19249	-.18584
120.	-.22316	-.22472	-.22506	-.22415	-.22203	-.21875	-.21443	-.20919	-.20319	-.19661	-.18965	-.18252
130.	-.20818	-.21079	-.21211	-.21209	-.21074	-.20809	-.20423	-.19927	-.19337	-.18670	-.17946	-.17189
140.	-.18583	-.18942	-.19166	-.19248	-.19185	-.18979	-.18636	-.18167	-.17587	-.16912	-.16163	-.15363
150.	-.15658	-.16102	-.16405	-.16559	-.16558	-.16403	-.16098	-.15653	-.15082	-.14400	-.13630	-.12794
160.	-.12144	-.12653	-.13018	-.13227	-.13275	-.13160	-.12884	-.12458	-.11893	-.11207	-.10420	-.09557
170.	-.08197	-.08747	-.09150	-.09394	-.09472	-.09381	-.09124	-.08710	-.08149	-.07460	-.06663	-.05783

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429
10.	.01064	.01216	.01245	.01148	.00929	.00594	.00155	-.00377	-.00985	-.01650	-.02352	-.03070
20.	-.01626	-.01462	-.01422	-.01505	-.01710	-.02030	-.02456	-.02974	-.03570	-.04224	-.04917	-.05628
30.	-.04282	-.04100	-.04039	-.04100	-.04282	-.04578	-.04981	-.05477	-.06052	-.06688	-.07366	-.08066
40.	-.06867	-.06660	-.06569	-.06599	-.06748	-.07011	-.07380	-.07845	-.08391	-.09002	-.09658	-.10340
50.	-.09336	-.09095	-.08967	-.08956	-.09061	-.09280	-.09606	-.10030	-.10537	-.11114	-.11741	-.12401
60.	-.11635	-.11353	-.11178	-.11115	-.11166	-.11330	-.11602	-.11973	-.12432	-.12966	-.13557	-.14188
70.	-.13699	-.13367	-.13135	-.13011	-.12997	-.13094	-.13300	-.13607	-.14008	-.14489	-.15036	-.15632
80.	-.15451	-.15062	-.14764	-.14566	-.14476	-.14495	-.14623	-.14856	-.15187	-.15605	-.16099	-.16653
90.	-.16804	-.16349	-.15977	-.15697	-.15519	-.15449	-.15488	-.15635	-.15886	-.16233	-.16666	-.17171
100.	-.17665	-.17139	-.16683	-.16313	-.16039	-.15869	-.15810	-.15862	-.16024	-.16291	-.16655	-.17105
110.	-.17940	-.17337	-.16794	-.16326	-.15949	-.15674	-.15508	-.15458	-.15524	-.15704	-.15994	-.16384
120.	-.17545	-.16864	-.16231	-.15663	-.15180	-.14795	-.14520	-.14363	-.14330	-.14421	-.14633	-.14960
130.	-.16419	-.15662	-.14940	-.14274	-.13686	-.13193	-.12810	-.12549	-.12417	-.12418	-.12554	-.12818
140.	-.14537	-.13709	-.12904	-.12147	-.11462	-.10868	-.10384	-.10025	-.09801	-.09719	-.09783	-.09989
150.	-.11919	-.11030	-.10155	-.09319	-.08550	-.07869	-.07298	-.06855	-.06551	-.06397	-.06398	-.06553
160.	-.08644	-.07708	-.06778	-.05883	-.05049	-.04301	-.03663	-.03154	-.02789	-.02580	-.02532	-.02647
170.	-.04846	-.03881	-.02918	-.01984	-.01110	-.00320	.00360	.00910	.01313	.01557	.01635	.01544

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670
10.	-.03782	-.04467	-.05103	-.05671	-.06154	-.06538	-.06810	-.06962	-.06991	-.06894	-.06675	-.06340
20.	-.06335	-.07017	-.07653	-.08224	-.08712	-.09103	-.09384	-.09548	-.09588	-.09505	-.09300	-.08980
30.	-.08765	-.09443	-.10079	-.10654	-.11150	-.11553	-.11849	-.12031	-.12092	-.12031	-.11850	-.11553
40.	-.11028	-.11700	-.12336	-.12917	-.13425	-.13844	-.14162	-.14369	-.14460	-.14430	-.14281	-.14018
50.	-.13074	-.13738	-.14373	-.14961	-.15483	-.15924	-.16270	-.16511	-.16639	-.16651	-.16545	-.16326
60.	-.14841	-.15494	-.16128	-.16725	-.17265	-.17732	-.18113	-.18395	-.18570	-.18633	-.18582	-.18418
70.	-.16259	-.16899	-.17531	-.18137	-.18698	-.19197	-.19618	-.19950	-.20182	-.20307	-.20321	-.20223
80.	-.17251	-.17873	-.18502	-.19118	-.19703	-.20238	-.20707	-.21097	-.21395	-.21592	-.21682	-.21663
90.	-.17733	-.18336	-.18959	-.19586	-.20196	-.20772	-.21295	-.21750	-.22123	-.22402	-.22580	-.22650
100.	-.17627	-.18205	-.18823	-.19460	-.20098	-.20718	-.21300	-.21826	-.22282	-.22652	-.22926	-.23095
110.	-.16862	-.17414	-.18024	-.18672	-.19339	-.20004	-.20648	-.21251	-.21794	-.22262	-.22639	-.22915
120.	-.15392	-.15917	-.16517	-.17175	-.17871	-.18583	-.19290	-.19971	-.20605	-.21172	-.21655	-.22041
130.	-.13205	-.13700	-.14291	-.14958	-.15681	-.16439	-.17208	-.17966	-.18688	-.19353	-.19942	-.20435
140.	-.10331	-.10800	-.11381	-.12056	-.12804	-.13604	-.14431	-.15259	-.16063	-.16820	-.17505	-.18099
150.	-.06858	-.07303	-.07874	-.08556	-.09326	-.10162	-.11037	-.11926	-.12801	-.13637	-.14406	-.15087
160.	-.02923	-.03349	-.03914	-.04600	-.05387	-.06250	-.07163	-.08099	-.09028	-.09924	-.10758	-.11506
170.	.01287	.00872	.00312	-.00377	-.01174	-.02054	-.02991	-.03956	-.04919	-.05853	-.06727	-.07517

ALPHA = 250.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754
10.	-.05844	-.05238	-.04574	-.03873	-.03157	-.02446	-.01763	-.01129	-.00562	-.00080	.00303	.00574
20.	-.08971	-.08380	-.07731	-.07043	-.06338	-.05637	-.04961	-.04330	-.03764	-.03280	-.02893	-.02614
30.	-.12026	-.11461	-.10837	-.10171	-.09485	-.08799	-.08133	-.07509	-.06945	-.06458	-.06063	-.05772
40.	-.14961	-.14434	-.13845	-.13210	-.12551	-.11887	-.11237	-.10622	-.10061	-.09570	-.09164	-.08856
50.	-.17721	-.17243	-.16699	-.16107	-.15483	-.14847	-.14219	-.13616	-.13059	-.12563	-.12143	-.11813
60.	-.20235	-.19819	-.19333	-.18793	-.18215	-.17615	-.17014	-.16428	-.15876	-.15374	-.14938	-.14580
70.	-.22422	-.22082	-.21667	-.21191	-.20667	-.20113	-.19545	-.18979	-.18434	-.17926	-.17470	-.17080
80.	-.24190	-.23938	-.23606	-.23206	-.22748	-.22247	-.21719	-.21178	-.20642	-.20127	-.19648	-.19221
90.	-.25435	-.25284	-.25049	-.24735	-.24353	-.23914	-.23431	-.22920	-.22395	-.21873	-.21369	-.20899
100.	-.26050	-.26013	-.25884	-.25667	-.25370	-.25000	-.24570	-.24091	-.23580	-.23051	-.22520	-.22004
110.	-.25935	-.26020	-.26006	-.25894	-.25688	-.25393	-.25019	-.24578	-.24081	-.23546	-.22987	-.22422
120.	-.25007	-.25218	-.25323	-.25320	-.25208	-.24992	-.24678	-.24274	-.23795	-.23253	-.22666	-.22052
130.	-.23216	-.23551	-.23774	-.23878	-.23861	-.23722	-.23467	-.23102	-.22640	-.22093	-.21479	-.20816
140.	-.20557	-.21008	-.21341	-.21546	-.21617	-.21552	-.21352	-.21024	-.20578	-.20026	-.19387	-.18679
150.	-.17087	-.17639	-.18067	-.18359	-.18507	-.18505	-.18353	-.18057	-.17625	-.17070	-.16410	-.15664
160.	-.12927	-.13556	-.14058	-.14418	-.14624	-.14671	-.14557	-.14285	-.13865	-.13307	-.12631	-.11855
170.	-.08260	-.08938	-.09486	-.09888	-.10131	-.10209	-.10118	-.09862	-.09449	-.08890	-.08203	-.07409

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143
10.	.00727	.00755	.00658	.00439	.00105	-.00334	-.00865	-.01471	-.02135	-.02836	-.03552	-.04263
20.	-.02452	-.02412	-.02495	-.02699	-.03017	-.03439	-.03954	-.04545	-.05194	-.05881	-.06586	-.07288
30.	-.05594	-.05534	-.05595	-.05773	-.06065	-.06460	-.06948	-.07512	-.08137	-.08802	-.09488	-.10175
40.	-.08655	-.08568	-.08596	-.08739	-.08993	-.09349	-.09798	-.10325	-.10915	-.11549	-.12208	-.12873
50.	-.11583	-.11458	-.11444	-.11541	-.11745	-.12051	-.12449	-.12927	-.13470	-.14063	-.14686	-.15322
60.	-.14312	-.14143	-.14076	-.14114	-.14256	-.14498	-.14832	-.15248	-.15733	-.16274	-.16852	-.17451
70.	-.16768	-.16543	-.16413	-.16380	-.16448	-.16612	-.16868	-.17209	-.17624	-.18100	-.18623	-.19177
80.	-.18857	-.18568	-.18364	-.18249	-.18228	-.18301	-.18466	-.18718	-.19050	-.19450	-.19908	-.20409
90.	-.20478	-.20117	-.19827	-.19619	-.19497	-.19466	-.19527	-.19677	-.19913	-.20226	-.20608	-.21047
100.	-.21518	-.21077	-.20695	-.20382	-.20149	-.20003	-.19948	-.19985	-.20114	-.20330	-.20628	-.20997
110.	-.21868	-.21342	-.20860	-.20436	-.20084	-.19814	-.19634	-.19549	-.19563	-.19675	-.19881	-.20176
120.	-.21428	-.20815	-.20230	-.19692	-.19216	-.18818	-.18509	-.18298	-.18193	-.18197	-.18308	-.18524
130.	-.20124	-.19425	-.18739	-.18088	-.17491	-.16966	-.16530	-.16195	-.15972	-.15868	-.15885	-.16023
140.	-.17924	-.17145	-.16366	-.15610	-.14900	-.14257	-.13702	-.13251	-.12918	-.12713	-.12642	-.12708
150.	-.14854	-.14007	-.13146	-.12299	-.11491	-.10747	-.10090	-.09538	-.09110	-.08818	-.08670	-.08672
160.	-.11004	-.10104	-.09181	-.08264	-.07381	-.06558	-.05821	-.05192	-.04690	-.04331	-.04124	-.04077
170.	-.06532	-.05598	-.04637	-.03676	-.02746	-.01874	-.01087	-.00410	-.00138	-.00540	-.00784	-.00861

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225
10.	-.04946	-.05580	-.06147	-.06629	-.07012	-.07283	-.07436	-.07464	-.07367	-.07148	-.06814	-.06375
20.	-.07964	-.08595	-.09161	-.09645	-.10032	-.10311	-.10472	-.10512	-.10429	-.10226	-.09908	-.09485
30.	-.10840	-.11464	-.12028	-.12515	-.12910	-.13201	-.13379	-.13439	-.13378	-.13200	-.12908	-.12513
40.	-.13522	-.14137	-.14699	-.15190	-.15595	-.15903	-.16104	-.16192	-.16164	-.16021	-.15767	-.15410
50.	-.15951	-.16553	-.17110	-.17607	-.18026	-.18356	-.18587	-.18711	-.18725	-.18628	-.18424	-.18119
60.	-.18053	-.18639	-.19191	-.19693	-.20129	-.20487	-.20754	-.20924	-.20991	-.20953	-.20810	-.20569
70.	-.19746	-.20311	-.20857	-.21365	-.21821	-.22211	-.22523	-.22748	-.22878	-.22910	-.22843	-.22679
80.	-.20937	-.21478	-.22014	-.22529	-.23008	-.23436	-.23799	-.24088	-.24292	-.24407	-.24428	-.24355
90.	-.21530	-.22041	-.22566	-.23088	-.23592	-.24062	-.24484	-.24845	-.25134	-.25343	-.25464	-.25495
100.	-.21428	-.21906	-.22417	-.22947	-.23477	-.23993	-.24479	-.24920	-.25303	-.25615	-.25848	-.25995
110.	-.20550	-.20991	-.21488	-.22023	-.22582	-.23147	-.23700	-.24227	-.24709	-.25132	-.25485	-.25755
120.	-.18839	-.19242	-.19722	-.20263	-.20850	-.21465	-.22088	-.22702	-.23286	-.23825	-.24300	-.24699
130.	-.16279	-.16643	-.17106	-.17653	-.18267	-.18930	-.19622	-.20321	-.21007	-.21658	-.22255	-.22780
140.	-.12907	-.13235	-.13682	-.14233	-.14872	-.15580	-.16335	-.17114	-.17893	-.18650	-.19360	-.20002
150.	-.08824	-.09120	-.09552	-.10107	-.10767	-.11513	-.12323	-.13170	-.14031	-.14878	-.15685	-.16429
160.	-.04192	-.04463	-.04884	-.05441	-.06118	-.06893	-.07744	-.08645	-.09567	-.10484	-.11367	-.12190
170.	-.00771	-.00515	.00101	.00458	.01145	.01939	.02816	.03749	.04711	.05672	.06602	.07474

ALPHA = 260.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903
10.	-.03617	-.04954	-.04254	-.03539	-.02830	-.02148	-.01515	-.00950	-.00469	-.00088	.00182	.00334
20.	-.09120	-.08475	-.07793	-.07093	-.06397	-.05726	-.05101	-.04541	-.04063	-.03680	-.03406	-.03247
30.	-.12541	-.11926	-.11271	-.10596	-.09922	-.09270	-.08659	-.08107	-.07632	-.07248	-.06967	-.06796
40.	-.15825	-.15251	-.14636	-.13998	-.13355	-.12729	-.12137	-.11598	-.11128	-.10742	-.10451	-.10264
50.	-.18908	-.18390	-.17827	-.17236	-.16636	-.16043	-.15478	-.14936	-.14493	-.14104	-.13800	-.13591
60.	-.21712	-.21264	-.20767	-.20237	-.19689	-.19141	-.18608	-.18108	-.17654	-.17262	-.16943	-.16706
70.	-.24148	-.23785	-.23369	-.22912	-.22428	-.21933	-.21441	-.20967	-.20525	-.20130	-.19792	-.19523
80.	-.26111	-.25848	-.25526	-.25156	-.24749	-.24317	-.23873	-.23431	-.23004	-.22605	-.22246	-.21939
90.	-.27485	-.27337	-.27124	-.26854	-.26534	-.26175	-.25786	-.25381	-.24972	-.24570	-.24188	-.23838
100.	-.28153	-.28131	-.28040	-.27881	-.27659	-.27381	-.27055	-.26692	-.26302	-.25898	-.25491	-.25093
110.	-.28000	-.28116	-.28155	-.28115	-.27999	-.27809	-.27551	-.27234	-.26866	-.26459	-.26026	-.25578
120.	-.26936	-.27194	-.27368	-.27452	-.27445	-.27347	-.27160	-.26890	-.26545	-.26137	-.25676	-.25178
130.	-.24904	-.25302	-.25610	-.25817	-.25919	-.25911	-.25794	-.25572	-.25251	-.24841	-.24355	-.23807
140.	-.21901	-.22430	-.22862	-.23185	-.23388	-.23465	-.23414	-.23237	-.22938	-.22528	-.22017	-.21423
150.	-.17991	-.18633	-.19173	-.19595	-.19886	-.20037	-.20044	-.19905	-.19626	-.19215	-.18685	-.18050
160.	-.13310	-.14039	-.14663	-.15162	-.15521	-.15729	-.15780	-.15672	-.15408	-.14997	-.14450	-.13786
170.	-.08065	-.08849	-.09526	-.10073	-.10475	-.10718	-.10797	-.10708	-.10453	-.10042	-.09486	-.08802
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828
10.	.00361	.00264	.00045	-.00289	-.00728	-.01258	-.01864	-.02527	-.03226	-.03941	-.04650	-.05332
20.	-.03210	-.03295	-.03499	-.03817	-.04238	-.04750	-.05338	-.05983	-.06666	-.07366	-.08061	-.08732
30.	-.06742	-.06806	-.06986	-.07277	-.07669	-.08151	-.08708	-.09324	-.09979	-.10654	-.11327	-.11980
40.	-.10186	-.10221	-.10366	-.10618	-.10969	-.11409	-.11923	-.12496	-.13112	-.13750	-.14392	-.15019
50.	-.13483	-.13478	-.13579	-.13780	-.14077	-.14460	-.14917	-.15435	-.15998	-.16589	-.17189	-.17781
60.	-.16559	-.16507	-.16551	-.16689	-.16917	-.17229	-.17615	-.18063	-.18560	-.19090	-.19638	-.20187
70.	-.19330	-.19220	-.19195	-.19256	-.19402	-.19628	-.19927	-.20290	-.20707	-.21164	-.21647	-.22143
80.	-.21692	-.21514	-.21408	-.21380	-.21428	-.21553	-.21750	-.22014	-.22335	-.22705	-.23113	-.23545
90.	-.23530	-.23274	-.23077	-.22945	-.22883	-.22892	-.22973	-.23121	-.23334	-.23604	-.23924	-.24283
100.	-.24718	-.24376	-.24078	-.23833	-.23648	-.23528	-.23479	-.23500	-.23591	-.23751	-.23973	-.24251
110.	-.25131	-.24698	-.24291	-.23924	-.23607	-.23350	-.23161	-.23045	-.23006	-.23045	-.23162	-.23352
120.	-.24658	-.24130	-.23612	-.23118	-.22665	-.22266	-.21932	-.21674	-.21500	-.21416	-.21423	-.21521
130.	-.23213	-.22593	-.21965	-.21347	-.20760	-.20219	-.19743	-.19345	-.19037	-.18830	-.18728	-.18736
140.	-.20763	-.20056	-.19325	-.18592	-.17879	-.17207	-.16598	-.16069	-.15636	-.15314	-.15111	-.15034
150.	-.17332	-.16551	-.15732	-.14899	-.14077	-.13292	-.12567	-.11925	-.11385	-.10963	-.10672	-.10521
160.	-.13023	-.12185	-.11297	-.10387	-.09481	-.08609	-.07795	-.07065	-.06441	-.05942	-.05583	-.05375
170.	-.08011	-.07137	-.06207	-.05248	-.04290	-.03363	-.02493	-.01709	-.01032	-.00485	-.00083	.00160
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688
10.	-.05965	-.06530	-.07011	-.07392	-.07663	-.07814	-.07841	-.07744	-.07525	-.07191	-.06753	-.06222
20.	-.09357	-.09917	-.10396	-.10778	-.11052	-.11211	-.11248	-.11163	-.10959	-.10642	-.10220	-.09708
30.	-.12591	-.13142	-.13617	-.14002	-.14283	-.14453	-.14507	-.14443	-.14263	-.13973	-.13580	-.13098
40.	-.15610	-.16149	-.16619	-.17005	-.17297	-.17484	-.17561	-.17527	-.17381	-.17129	-.16778	-.16339
50.	-.18347	-.18869	-.19332	-.19721	-.20024	-.20234	-.20342	-.20346	-.20246	-.20044	-.19748	-.19365
60.	-.20719	-.21220	-.21673	-.22065	-.22385	-.22621	-.22768	-.22820	-.22777	-.22639	-.22410	-.22098
70.	-.22635	-.23109	-.23550	-.23946	-.24283	-.24552	-.24745	-.24856	-.24881	-.24820	-.24674	-.24448
80.	-.23989	-.24431	-.24858	-.25256	-.25615	-.25922	-.26169	-.26348	-.26453	-.26482	-.26433	-.26308
90.	-.24671	-.25076	-.25486	-.25888	-.26270	-.26620	-.26928	-.27184	-.27381	-.27513	-.27575	-.27566
100.	-.24576	-.24939	-.25329	-.25734	-.26141	-.26538	-.26913	-.27255	-.27553	-.27799	-.27984	-.28103
110.	-.23610	-.23927	-.24295	-.24702	-.25135	-.25583	-.26030	-.26463	-.26869	-.27237	-.27554	-.27811
120.	-.21708	-.21978	-.22322	-.22731	-.23191	-.23690	-.24210	-.24738	-.25256	-.25749	-.26203	-.26602
130.	-.18853	-.19075	-.19396	-.19806	-.20292	-.20840	-.21433	-.22054	-.22682	-.23300	-.23887	-.24428
140.	-.15085	-.15262	-.15561	-.15971	-.16481	-.17076	-.17736	-.18443	-.19174	-.19907	-.20620	-.21292
150.	-.10514	-.10653	-.10932	-.11343	-.11874	-.12508	-.13226	-.14007	-.14826	-.15659	-.16481	-.17266
160.	-.05325	-.05433	-.05697	-.06108	-.06654	-.07319	-.08082	-.08920	-.09808	-.10718	-.11623	-.12496
170.	.00239	.00150	.00104	.00516	.01072	.01756	.02547	.03421	.04351	.05310	.06267	.07195



ALPHA = 270.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927
10.	-.05224	-.04525	-.03811	-.03103	-.02423	-.01792	-.01228	-.00749	-.00369	-.00100	.00050	.00076
20.	-.08999	-.08320	-.07624	-.06932	-.06267	-.05648	-.05093	-.04621	-.04244	-.03975	-.03821	-.03788
30.	-.12681	-.12033	-.11368	-.10705	-.10064	-.09465	-.08927	-.08465	-.08093	-.07824	-.07664	-.07620
40.	-.16212	-.15610	-.14988	-.14365	-.13759	-.13190	-.12674	-.12228	-.11864	-.11594	-.11426	-.11365
50.	-.19524	-.18982	-.18417	-.17847	-.17288	-.16757	-.16272	-.15846	-.15492	-.15222	-.15043	-.14961
60.	-.22534	-.22067	-.21575	-.21070	-.20570	-.20089	-.19641	-.19241	-.18901	-.18630	-.18438	-.18329
70.	-.25144	-.24769	-.24364	-.23940	-.23511	-.23090	-.22689	-.22321	-.21997	-.21726	-.21518	-.21377
80.	-.27241	-.26974	-.26672	-.26344	-.26000	-.25650	-.25304	-.24974	-.24669	-.24399	-.24172	-.23994
90.	-.28702	-.28559	-.28376	-.28157	-.27910	-.27641	-.27359	-.27073	-.26791	-.26522	-.26274	-.26054
100.	-.29399	-.29395	-.29343	-.29247	-.29107	-.28929	-.28719	-.28482	-.28226	-.27958	-.27687	-.27420
110.	-.29213	-.29357	-.29447	-.29481	-.29458	-.29379	-.29245	-.29062	-.28833	-.28568	-.28272	-.27956
120.	-.28043	-.28341	-.28578	-.28748	-.28846	-.28868	-.28815	-.28686	-.28488	-.28224	-.27904	-.27538
130.	-.25831	-.26280	-.26663	-.26968	-.27185	-.27308	-.27334	-.27261	-.27091	-.26831	-.26487	-.26071
140.	-.22574	-.23165	-.23683	-.24114	-.24443	-.24660	-.24760	-.24739	-.24597	-.24340	-.23974	-.23511
150.	-.18341	-.19054	-.19691	-.20230	-.20655	-.20955	-.21119	-.21143	-.21025	-.20770	-.20385	-.19883
160.	-.13280	-.14089	-.14816	-.15439	-.15939	-.16302	-.16516	-.16575	-.16476	-.16223	-.15824	-.15290
170.	-.07616	-.08484	-.09268	-.09944	-.10491	-.10894	-.11139	-.11219	-.11132	-.10881	-.10473	-.09920
BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464
10.	-.00022	-.00241	-.00576	-.01015	-.01545	-.02150	-.02813	-.03511	-.04225	-.04933	-.05613	-.06245
20.	-.03876	-.04083	-.04403	-.04825	-.05336	-.05923	-.06565	-.07245	-.07941	-.08632	-.09297	-.09916
30.	-.07691	-.07877	-.08171	-.08565	-.09046	-.09600	-.10210	-.10858	-.11524	-.12187	-.12827	-.13426
40.	-.11413	-.11569	-.11827	-.12181	-.12618	-.13127	-.13690	-.14293	-.14915	-.15538	-.16144	-.16713
50.	-.14978	-.15094	-.15305	-.15606	-.15986	-.16434	-.16937	-.17479	-.18044	-.18614	-.19173	-.19704
60.	-.18308	-.18374	-.18527	-.18760	-.19068	-.19441	-.19867	-.20333	-.20826	-.21330	-.21831	-.22312
70.	-.21309	-.21316	-.21397	-.21550	-.21770	-.22050	-.22383	-.22758	-.23163	-.23587	-.24016	-.24437
80.	-.23871	-.23808	-.23805	-.23863	-.23980	-.24152	-.24375	-.24642	-.24943	-.25272	-.25616	-.25966
90.	-.25869	-.25725	-.25626	-.25576	-.25575	-.25624	-.25721	-.25863	-.26047	-.26265	-.26513	-.26781
100.	-.27167	-.26934	-.26730	-.26559	-.26427	-.26338	-.26295	-.26300	-.26351	-.26448	-.26588	-.26765
110.	-.27630	-.27302	-.26983	-.26683	-.26411	-.26175	-.25982	-.25838	-.25747	-.25713	-.25736	-.25815
120.	-.27136	-.26710	-.26274	-.25840	-.25423	-.25034	-.24685	-.24388	-.24150	-.23980	-.23882	-.23860
130.	-.25594	-.25071	-.24519	-.23954	-.23393	-.22853	-.22351	-.21902	-.21519	-.21214	-.20997	-.20874
140.	-.22965	-.22352	-.21692	-.21004	-.20309	-.19629	-.18983	-.18392	-.17873	-.17443	-.17114	-.16896
150.	-.19277	-.18587	-.17833	-.17039	-.16228	-.15426	-.14656	-.13942	-.13306	-.12767	-.12341	-.12042
160.	-.14638	-.13888	-.13062	-.12186	-.11286	-.10390	-.09524	-.08716	-.07989	-.07365	-.06865	-.06502
170.	-.09239	-.08451	-.07580	-.06653	-.05696	-.04741	-.03815	-.02947	-.02163	-.01487	-.00939	-.00537
BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076
10.	-.06809	-.07288	-.07668	-.07937	-.08087	-.08113	-.08015	-.07795	-.07461	-.07022	-.06492	-.05886
20.	-.10471	-.10944	-.11320	-.11589	-.11743	-.11776	-.11688	-.11481	-.11162	-.10740	-.10228	-.09642
30.	-.13965	-.14427	-.14798	-.15068	-.15227	-.15272	-.15200	-.15014	-.14720	-.14326	-.13845	-.13291
40.	-.17229	-.17675	-.18039	-.18309	-.18477	-.18538	-.18490	-.18334	-.18076	-.17722	-.17285	-.16776
50.	-.20189	-.20615	-.20969	-.21239	-.21418	-.21500	-.21483	-.21367	-.21156	-.20855	-.20475	-.20027
60.	-.22759	-.23159	-.23500	-.23770	-.23963	-.24072	-.24093	-.24026	-.23874	-.23640	-.23333	-.22960
70.	-.24837	-.25206	-.25530	-.25801	-.26009	-.26150	-.26218	-.26211	-.26130	-.25977	-.25757	-.25476
80.	-.26312	-.26642	-.26947	-.27217	-.27444	-.27622	-.27744	-.27808	-.27811	-.27753	-.27636	-.27463
90.	-.27063	-.27349	-.27631	-.27901	-.28149	-.28369	-.28553	-.28697	-.28796	-.28847	-.28848	-.28799
100.	-.26976	-.27213	-.27469	-.27737	-.28008	-.28274	-.28528	-.28760	-.28965	-.29136	-.29268	-.29356
110.	-.25949	-.26133	-.26361	-.26627	-.26922	-.27238	-.27565	-.27892	-.28211	-.28511	-.28783	-.29020
120.	-.23914	-.24042	-.24241	-.24504	-.24824	-.25190	-.25593	-.26018	-.26454	-.26888	-.27306	-.27694
130.	-.20848	-.20921	-.21091	-.21351	-.21695	-.22111	-.22588	-.23110	-.23663	-.24228	-.24789	-.25329
140.	-.16797	-.16818	-.16959	-.17217	-.17583	-.18046	-.18592	-.19204	-.19864	-.20552	-.21247	-.21928
150.	-.11878	-.11854	-.11972	-.12227	-.12611	-.13114	-.13720	-.14410	-.15164	-.15958	-.16768	-.17571
160.	-.06288	-.06230	-.06328	-.06581	-.06981	-.07514	-.08166	-.08916	-.09742	-.10618	-.11518	-.12414
170.	-.00292	-.00211	-.00298	-.00550	-.00958	-.01511	-.02192	-.02980	-.03851	-.04778	-.05734	-.06690

ALPHA = 280.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825
10.	-.04679	-.03966	-.03259	-.02580	-.01949	-.01387	-.00909	-.00531	-.00263	-.00115	-.00090	-.00190
20.	-.08610	-.07917	-.07229	-.06568	-.05953	-.05404	-.04937	-.04566	-.04303	-.04155	-.04127	-.04220
30.	-.12441	-.11781	-.11125	-.10494	-.09906	-.09379	-.08930	-.08571	-.08315	-.08168	-.08135	-.08218
40.	-.16113	-.15500	-.14890	-.14301	-.13751	-.13256	-.12832	-.12491	-.12245	-.12099	-.12060	-.12127
50.	-.19552	-.19003	-.18453	-.17920	-.17419	-.16967	-.16576	-.16259	-.16026	-.15882	-.15834	-.15881
60.	-.22675	-.22204	-.21730	-.21267	-.20830	-.20431	-.20082	-.19795	-.19578	-.19437	-.19377	-.19400
70.	-.25378	-.25003	-.24621	-.24244	-.23883	-.23549	-.23252	-.23001	-.22804	-.22666	-.22593	-.22585
80.	-.27544	-.27283	-.27010	-.26734	-.26463	-.26206	-.25969	-.25761	-.25588	-.25454	-.25365	-.25322
90.	-.29046	-.28915	-.28767	-.28607	-.28439	-.28270	-.28103	-.27944	-.27798	-.27670	-.27562	-.27480
100.	-.29752	-.29765	-.29755	-.29724	-.29671	-.29600	-.29511	-.29407	-.29292	-.29169	-.29042	-.28915
110.	-.29535	-.29703	-.29843	-.29950	-.30022	-.30055	-.30050	-.30005	-.29924	-.29807	-.29659	-.29484
120.	-.28294	-.28623	-.28917	-.29168	-.29367	-.29510	-.29591	-.29609	-.29562	-.29452	-.29282	-.29058
130.	-.25968	-.26455	-.26902	-.27295	-.27621	-.27872	-.28039	-.28118	-.28105	-.28002	-.27811	-.27539
140.	-.22554	-.23190	-.23779	-.24304	-.24749	-.25101	-.25348	-.25484	-.25504	-.25407	-.25197	-.24879
150.	-.18126	-.18890	-.19603	-.20243	-.20790	-.21229	-.21546	-.21731	-.21779	-.21688	-.21461	-.21104
160.	-.12839	-.13702	-.14510	-.15239	-.15866	-.16373	-.16743	-.16967	-.17036	-.16949	-.16709	-.16323
170.	-.06927	-.07852	-.08720	-.09504	-.10181	-.10731	-.11135	-.11382	-.11465	-.11381	-.11133	-.10728

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032
10.	-.00410	-.00746	-.01185	-.01716	-.02321	-.02983	-.03682	-.04395	-.05103	-.05782	-.06412	-.06975
20.	-.04431	-.04754	-.05179	-.05692	-.06279	-.06921	-.07599	-.08293	-.08981	-.09642	-.10256	-.10805
30.	-.08413	-.08715	-.09114	-.09599	-.10154	-.10763	-.11408	-.12068	-.12724	-.13355	-.13943	-.14470
40.	-.12299	-.12571	-.12934	-.13378	-.13889	-.14451	-.15047	-.15660	-.16270	-.16859	-.17409	-.17904
50.	-.16023	-.16256	-.16572	-.16962	-.17413	-.17913	-.18446	-.18996	-.19546	-.20079	-.20579	-.21032
60.	-.19504	-.19688	-.19944	-.20266	-.20644	-.21065	-.21518	-.21989	-.22463	-.22925	-.23363	-.23762
70.	-.22644	-.22768	-.22952	-.23192	-.23479	-.23806	-.24162	-.24536	-.24918	-.25295	-.25656	-.25990
80.	-.25328	-.25381	-.25480	-.25623	-.25804	-.26019	-.26261	-.26522	-.26795	-.27071	-.27342	-.27600
90.	-.27424	-.27396	-.27399	-.27430	-.27491	-.27577	-.27688	-.27820	-.27968	-.28128	-.28296	-.28465
100.	-.28791	-.28674	-.28569	-.28477	-.28403	-.28347	-.28313	-.28300	-.28309	-.28341	-.28393	-.28465
110.	-.29288	-.29075	-.28854	-.28630	-.28411	-.28202	-.28011	-.27843	-.27704	-.27596	-.27525	-.27491
120.	-.28787	-.28475	-.28134	-.27774	-.27404	-.27038	-.26685	-.26356	-.26062	-.25811	-.25612	-.25469
130.	-.27193	-.26784	-.26325	-.25829	-.25312	-.24788	-.24275	-.23788	-.23341	-.22949	-.22622	-.22372
140.	-.24464	-.23964	-.23395	-.22773	-.22117	-.21448	-.20786	-.20150	-.19561	-.19036	-.18591	-.18239
150.	-.20630	-.20051	-.19386	-.18655	-.17880	-.17084	-.16293	-.15529	-.14816	-.14176	-.13629	-.13190
160.	-.15802	-.15162	-.14423	-.13608	-.12741	-.11848	-.10956	-.10093	-.09285	-.08557	-.07929	-.07423
170.	-.10178	-.09500	-.08715	-.07847	-.06921	-.05967	-.05013	-.04088	-.03220	-.02435	-.01758	-.01209

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406
10.	-.07452	-.07831	-.08098	-.08246	-.08271	-.08172	-.07951	-.07616	-.07176	-.06645	-.06040	-.05378
20.	-.11272	-.11643	-.11907	-.12054	-.12082	-.11989	-.11778	-.11455	-.11031	-.10517	-.09931	-.09288
30.	-.14919	-.15278	-.15534	-.15681	-.15714	-.15631	-.15436	-.15134	-.14735	-.14250	-.13695	-.13086
40.	-.18328	-.18669	-.18915	-.19061	-.19100	-.19033	-.18861	-.18589	-.18225	-.17782	-.17271	-.16709
50.	-.21422	-.21739	-.21973	-.22116	-.22165	-.22118	-.21975	-.21743	-.21427	-.21037	-.20585	-.20085
60.	-.24110	-.24398	-.24615	-.24756	-.24816	-.24793	-.24689	-.24505	-.24249	-.23927	-.23549	-.23128
70.	-.26288	-.26539	-.26736	-.26873	-.26947	-.26954	-.26895	-.26772	-.26587	-.26348	-.26060	-.25734
80.	-.27836	-.28044	-.28217	-.28351	-.28440	-.28483	-.28478	-.28424	-.28325	-.28182	-.28001	-.27786
90.	-.28632	-.28791	-.28936	-.29065	-.29172	-.29255	-.29311	-.29338	-.29336	-.29304	-.29244	-.29157
100.	-.28554	-.28658	-.28773	-.28895	-.29022	-.29150	-.29274	-.29390	-.29496	-.29587	-.29662	-.29717
110.	-.27497	-.27541	-.27623	-.27739	-.27887	-.28062	-.28259	-.28471	-.28692	-.28916	-.29136	-.29344
120.	-.25388	-.25370	-.25417	-.25527	-.25697	-.25921	-.26193	-.26504	-.26845	-.27205	-.27575	-.27941
130.	-.22204	-.22126	-.22139	-.22242	-.22432	-.22705	-.23051	-.23459	-.23919	-.24415	-.24932	-.25455
140.	-.17992	-.17856	-.17836	-.17933	-.18143	-.18461	-.18876	-.19376	-.19945	-.20567	-.21223	-.21892
150.	-.12873	-.12688	-.12640	-.12731	-.12958	-.13315	-.13789	-.14368	-.15033	-.15764	-.16539	-.17335
160.	-.07052	-.06829	-.06759	-.06846	-.07086	-.07473	-.07994	-.08633	-.09372	-.10187	-.11055	-.11948
170.	-.00805	-.00557	-.00474	-.00558	-.00807	-.01212	-.01762	-.02440	-.03225	-.04093	-.05018	-.05973

ALPHA = 290.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	00020	00734	01419	02056	02623	03105	03486	03754	03903	03927	03825	03601
10.	-03998	-03292	-02613	-01984	-01422	-00946	-00569	-00303	-00156	-00133	-00234	-00456
20.	-07966	-07279	-06621	-06009	-05464	-05002	-04637	-04379	-04237	-04215	-04314	-04530
30.	-11829	-11177	-10551	-09970	-09453	-09014	-08667	-08424	-08290	-08270	-08365	-08572
40.	-15528	-14924	-14345	-13808	-13330	-12925	-12605	-12381	-12259	-12243	-12332	-12526
50.	-18991	-18451	-17933	-17453	-17027	-16666	-16383	-16184	-16077	-16065	-16148	-16324
60.	-22130	-21670	-21230	-20823	-20461	-20157	-19918	-19752	-19664	-19658	-19732	-19885
70.	-24843	-24480	-24134	-23815	-23533	-23296	-23112	-22986	-22921	-22921	-22985	-23111
80.	-27013	-26765	-26529	-26314	-26125	-25968	-25848	-25769	-25732	-25739	-25791	-25884
90.	-28509	-28393	-28285	-28188	-28106	-28040	-27994	-27968	-27963	-27979	-28016	-28072
100.	-29200	-29230	-29263	-29298	-29334	-29371	-29406	-29439	-29469	-29494	-29515	-29531
110.	-28958	-29146	-29330	-29507	-29671	-29817	-29940	-30037	-30104	-30140	-30144	-30115
120.	-27683	-28032	-28374	-28698	-28994	-29253	-29467	-29629	-29736	-29782	-29768	-29693
130.	-25311	-25822	-26319	-26788	-27214	-27585	-27889	-28116	-28261	-28318	-28286	-28166
140.	-21844	-22504	-23147	-23751	-24299	-24774	-25161	-25450	-25630	-25697	-25649	-25487
150.	-17354	-18145	-18913	-19634	-20287	-20853	-21313	-21654	-21865	-21941	-21878	-21679
160.	-12001	-12892	-13756	-14568	-15303	-15938	-16454	-16836	-17071	-17153	-17079	-16852
170.	-06020	-06974	-07899	-08768	-09554	-10233	-10784	-11192	-11442	-11528	-11447	-11202

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	03261	02816	02279	01667	00998	00292	-00429	-01143	-01828	-02464	-03032	-03513
10.	-00793	-01233	-01765	-02371	-03034	-03732	-04446	-05152	-05831	-06460	-07022	-07498
20.	-04858	-05287	-05803	-06393	-07036	-07715	-08408	-09094	-09753	-10364	-10909	-11372
30.	-08885	-09293	-09786	-10347	-10959	-11605	-12264	-12916	-13542	-14123	-14640	-15079
40.	-12817	-13197	-13654	-14175	-14743	-15341	-15952	-16556	-17135	-17672	-18151	-18556
50.	-16587	-16929	-17340	-17807	-18317	-18853	-19400	-19940	-20458	-20937	-21364	-21724
60.	-20112	-20407	-20760	-21160	-21596	-22054	-22520	-22980	-23420	-23827	-24188	-24493
70.	-23295	-23531	-23813	-24132	-24478	-24841	-25209	-25572	-25918	-26237	-26520	-26756
80.	-26017	-26185	-26384	-26607	-26847	-27098	-27351	-27599	-27834	-28049	-28238	-28395
90.	-28147	-28237	-28340	-28453	-28572	-28694	-28815	-28931	-29039	-29136	-29218	-29284
100.	-29540	-29543	-29540	-29531	-29515	-29495	-29469	-29439	-29406	-29371	-29334	-29298
110.	-30055	-29964	-29847	-29706	-29546	-29371	-29188	-29001	-28816	-28639	-28475	-28329
120.	-29561	-29373	-29138	-28861	-28551	-28217	-27870	-27521	-27179	-26855	-26559	-26300
130.	-27962	-27679	-27326	-26915	-26456	-25966	-25458	-24947	-24450	-23981	-23555	-23184
140.	-25215	-24843	-24381	-23844	-23247	-22610	-21951	-21290	-20648	-20044	-19496	-19021
150.	-21349	-20900	-20343	-19697	-18981	-18217	-17427	-16637	-15869	-15148	-14494	-13929
160.	-16478	-15968	-15339	-14609	-13800	-12938	-12047	-11156	-10292	-09480	-08745	-08110
170.	-10800	-10253	-09577	-08794	-07928	-07004	-06050	-05096	-04170	-03301	-02515	-01836

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	03894	04163	04312	04335	04234	04010	03670	03225	02688	02076	01406	00701
10.	-07875	-08141	-08288	-08311	-08210	-07988	-07651	-07211	-06679	-06073	-05410	-04712
20.	-11737	-11995	-12137	-12159	-12060	-11844	-11516	-11087	-10571	-09981	-09338	-08659
30.	-15426	-15669	-15803	-15823	-15728	-15521	-15208	-14800	-14307	-13747	-13134	-12488
40.	-18875	-19099	-19221	-19238	-19148	-18954	-18663	-18283	-17826	-17306	-16737	-16139
50.	-22008	-22206	-22313	-22325	-22242	-22066	-21804	-21462	-21051	-20583	-20074	-19538
60.	-24732	-24898	-24985	-24992	-24918	-24764	-24537	-24243	-23890	-23490	-23054	-22596
70.	-26941	-27067	-27131	-27131	-27067	-26942	-26758	-26521	-26239	-25920	-25574	-25211
80.	-28515	-28595	-28631	-28624	-28573	-28479	-28346	-28178	-27979	-27756	-27516	-27266
90.	-29330	-29356	-29362	-29345	-29308	-29252	-29177	-29087	-28984	-28871	-28752	-28630
100.	-29263	-29230	-29200	-29174	-29153	-29138	-29128	-29125	-29128	-29138	-29153	-29174
110.	-28206	-28109	-28042	-28006	-28002	-28031	-28092	-28182	-28299	-28440	-28600	-28775
120.	-26086	-25924	-25817	-25771	-25785	-25860	-25993	-26180	-26415	-26692	-27002	-27336
130.	-22880	-22653	-22508	-22451	-22483	-22603	-22807	-23090	-23443	-23854	-24312	-24803
140.	-18633	-18345	-18164	-18097	-18146	-18308	-18579	-18952	-19414	-19951	-20547	-21185
150.	-13469	-13128	-12916	-12841	-12904	-13103	-13432	-13882	-14438	-15084	-15800	-16565
160.	-07594	-07212	-06977	-06895	-06969	-07196	-07570	-08080	-08709	-09439	-10248	-11110
170.	-01285	-00878	-00628	-00541	-00622	-00868	-01270	-01817	-02492	-03275	-04142	-05066

ALPHA = 300.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261
10.	-.03202	-.02524	-.01895	-.01334	-.00858	-.00483	-.00218	-.00073	-.00051	-.00153	-.00377	-.00715
20.	-.07085	-.06427	-.05817	-.05275	-.04816	-.04454	-.04202	-.04065	-.04049	-.04153	-.04376	-.04709
30.	-.10863	-.10238	-.09661	-.09149	-.08718	-.08381	-.08148	-.08026	-.08019	-.08127	-.08347	-.08672
40.	-.14477	-.13900	-.13369	-.12901	-.12509	-.12206	-.12001	-.11900	-.11906	-.12020	-.12236	-.12550
50.	-.17857	-.17342	-.16872	-.16461	-.16122	-.15864	-.15696	-.15623	-.15646	-.15766	-.15978	-.16276
60.	-.20917	-.20481	-.20088	-.19749	-.19475	-.19274	-.19152	-.19113	-.19158	-.19286	-.19492	-.19771
70.	-.23557	-.23217	-.22917	-.22666	-.22471	-.22339	-.22273	-.22276	-.22347	-.22484	-.22683	-.22938
80.	-.25662	-.25435	-.25245	-.25097	-.24996	-.24944	-.24944	-.24996	-.25097	-.25245	-.25435	-.25662
90.	-.27106	-.27009	-.26944	-.26914	-.26920	-.26961	-.27036	-.27143	-.27279	-.27439	-.27619	-.27813
100.	-.27760	-.27806	-.27881	-.27982	-.28106	-.28249	-.28408	-.28577	-.28751	-.28924	-.29092	-.29250
110.	-.27500	-.27700	-.27925	-.28167	-.28418	-.28672	-.28920	-.29155	-.29369	-.29557	-.29712	-.29830
120.	-.26227	-.26587	-.26967	-.27354	-.27737	-.28104	-.28444	-.28747	-.29004	-.29206	-.29347	-.29424
130.	-.23881	-.24400	-.24933	-.25463	-.25976	-.26456	-.26887	-.27257	-.27555	-.27771	-.27898	-.27934
140.	-.20464	-.21130	-.21805	-.22471	-.23105	-.23689	-.24205	-.24637	-.24973	-.25202	-.25317	-.25314
150.	-.16048	-.16842	-.17641	-.18422	-.19161	-.19836	-.20425	-.20912	-.21281	-.21520	-.21624	-.21588
160.	-.10790	-.11682	-.12577	-.13448	-.14268	-.15012	-.15658	-.16186	-.16581	-.16829	-.16924	-.16862
170.	-.04921	-.05875	-.06830	-.07758	-.08628	-.09417	-.10098	-.10653	-.11063	-.11316	-.11406	-.11328

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894
10.	-.01157	-.01690	-.02297	-.02960	-.03660	-.04373	-.05080	-.05758	-.06388	-.06948	-.07424	-.07800
20.	-.05143	-.05664	-.06258	-.06905	-.07586	-.08281	-.08968	-.09626	-.10235	-.10778	-.11237	-.11598
30.	-.09093	-.09596	-.10166	-.10786	-.11437	-.12099	-.12753	-.13378	-.13955	-.14467	-.14898	-.15235
40.	-.12951	-.13427	-.13964	-.14546	-.15154	-.15771	-.16377	-.16954	-.17485	-.17954	-.18345	-.18648
50.	-.16652	-.17093	-.17586	-.18117	-.18668	-.19224	-.19768	-.20283	-.20752	-.21163	-.21503	-.21761
60.	-.20114	-.20511	-.20949	-.21415	-.21896	-.22376	-.22841	-.23276	-.23669	-.24008	-.24282	-.24483
70.	-.23241	-.23584	-.23955	-.24343	-.24737	-.25124	-.25494	-.25833	-.26133	-.26385	-.26579	-.26711
80.	-.25919	-.26197	-.26489	-.26785	-.27076	-.27355	-.27611	-.27838	-.28028	-.28176	-.28278	-.28329
90.	-.28016	-.28221	-.28421	-.28611	-.28786	-.28939	-.29066	-.29164	-.29229	-.29259	-.29253	-.29212
100.	-.29392	-.29515	-.29614	-.29687	-.29731	-.29745	-.29729	-.29683	-.29608	-.29507	-.29383	-.29239
110.	-.29907	-.29941	-.29931	-.29877	-.29781	-.29646	-.29475	-.29274	-.29050	-.28808	-.28557	-.28303
120.	-.29434	-.29376	-.29253	-.29068	-.28826	-.28536	-.28206	-.27845	-.27465	-.27078	-.26695	-.26328
130.	-.27877	-.27729	-.27493	-.27178	-.26793	-.26350	-.25861	-.25343	-.24810	-.24279	-.23766	-.23287
140.	-.25195	-.24961	-.24621	-.24185	-.23665	-.23079	-.22443	-.21777	-.21101	-.20436	-.19802	-.19218
150.	-.21414	-.21107	-.20676	-.20135	-.19499	-.18789	-.18025	-.17232	-.16432	-.15651	-.14912	-.14238
160.	-.16646	-.16282	-.15781	-.15158	-.14433	-.13627	-.12765	-.11873	-.10978	-.10107	-.09287	-.08542
170.	-.11085	-.10685	-.10140	-.09467	-.08685	-.07819	-.06895	-.05941	-.04986	-.04058	-.03188	-.02399

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020
10.	-.08064	-.08210	-.08232	-.08129	-.07906	-.07568	-.07125	-.06593	-.05985	-.05322	-.04623	-.03909
20.	-.11851	-.11988	-.12004	-.11899	-.11677	-.11344	-.10910	-.10388	-.09795	-.09148	-.08466	-.07772
30.	-.15469	-.15590	-.15597	-.15489	-.15269	-.14944	-.14524	-.14021	-.13450	-.12830	-.12179	-.11517
40.	-.18853	-.18954	-.18948	-.18835	-.18618	-.18304	-.17903	-.17427	-.16890	-.16308	-.15700	-.15084
50.	-.21929	-.22002	-.21979	-.21859	-.21647	-.21349	-.20973	-.20532	-.20039	-.19508	-.18957	-.18400
60.	-.24605	-.24644	-.24599	-.24471	-.24265	-.23986	-.23643	-.23247	-.22808	-.22342	-.21862	-.21382
70.	-.26777	-.26775	-.26704	-.26567	-.26367	-.26112	-.25809	-.25467	-.25096	-.24707	-.24313	-.23926
80.	-.28329	-.28278	-.28176	-.28028	-.27838	-.27611	-.27354	-.27076	-.26784	-.26488	-.26197	-.25918
90.	-.29137	-.29030	-.28894	-.28734	-.28554	-.28359	-.28157	-.27952	-.27752	-.27561	-.27387	-.27234
100.	-.29081	-.28912	-.28738	-.28564	-.28396	-.28238	-.28096	-.27974	-.27874	-.27802	-.27758	-.27743
110.	-.28055	-.27820	-.27606	-.27418	-.27263	-.27145	-.27067	-.27033	-.27043	-.27097	-.27194	-.27329
120.	-.25988	-.25685	-.25428	-.25226	-.25085	-.25008	-.24998	-.25056	-.25179	-.25364	-.25606	-.25896
130.	-.22855	-.22485	-.22188	-.21972	-.21844	-.21808	-.21865	-.22014	-.22249	-.22564	-.22949	-.23393
140.	-.18702	-.18269	-.17933	-.17704	-.17590	-.17592	-.17712	-.17945	-.18285	-.18722	-.19241	-.19828
150.	-.13648	-.13162	-.12793	-.12553	-.12449	-.12485	-.12659	-.12966	-.13397	-.13939	-.14574	-.15284
160.	-.07896	-.07368	-.06974	-.06726	-.06631	-.06692	-.06909	-.07273	-.07774	-.08396	-.09121	-.09927
170.	-.01718	-.01163	-.00753	-.00500	-.00410	-.00488	-.00731	-.01131	-.01676	-.02349	-.03131	-.03997

ALPHA = 310.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.01419	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816
10.	-.02315	-.01686	-.01125	-.00650	-.00275	-.00011	.00133	.00154	.00050	-.00175	-.00515	-.00958
20.	-.05995	-.05385	-.04843	-.04386	-.04027	-.03778	-.03645	-.03634	-.03744	-.03972	-.04311	-.04751
30.	-.09573	-.08995	-.08484	-.08056	-.07725	-.07499	-.07387	-.07390	-.07510	-.07743	-.08081	-.08515
40.	-.12992	-.12459	-.11993	-.11607	-.11314	-.11123	-.11038	-.11064	-.11198	-.11437	-.11774	-.12198
50.	-.16185	-.15712	-.15304	-.14974	-.14732	-.14585	-.14538	-.14591	-.14744	-.14992	-.15327	-.15739
60.	-.19072	-.18674	-.18340	-.18080	-.17902	-.17810	-.17809	-.17898	-.18074	-.18332	-.18665	-.19061
70.	-.21557	-.21251	-.21006	-.20831	-.20730	-.20706	-.20761	-.20892	-.21096	-.21367	-.21695	-.22072
80.	-.23533	-.23335	-.23195	-.23119	-.23109	-.23165	-.23285	-.23466	-.23702	-.23986	-.24310	-.24663
90.	-.24880	-.24805	-.24786	-.24823	-.24917	-.25063	-.25258	-.25495	-.25768	-.26068	-.26385	-.26711
100.	-.25476	-.25537	-.25651	-.25815	-.26023	-.26270	-.26547	-.26847	-.27159	-.27476	-.27786	-.28081
110.	-.25203	-.25412	-.25670	-.25969	-.26300	-.26654	-.27020	-.27386	-.27741	-.28074	-.28377	-.28638
120.	-.23970	-.24331	-.24737	-.25176	-.25635	-.26099	-.26555	-.26990	-.27388	-.27739	-.28033	-.28259
130.	-.21721	-.22231	-.22784	-.23361	-.23945	-.24519	-.25065	-.25566	-.26007	-.26376	-.26659	-.26850
140.	-.18456	-.19107	-.19794	-.20502	-.21203	-.21879	-.22508	-.23071	-.23552	-.23936	-.24211	-.24368
150.	-.14247	-.15020	-.15827	-.16644	-.17447	-.18210	-.18911	-.19528	-.20043	-.20440	-.20707	-.20835
160.	-.09243	-.10109	-.11008	-.11911	-.12792	-.13623	-.14379	-.15038	-.15579	-.15986	-.16246	-.16352
170.	-.03665	-.04590	-.05546	-.06503	-.07432	-.08306	-.09097	-.09782	-.10340	-.10753	-.11009	-.11101

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.02279	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163
10.	-.01493	-.02101	-.02766	-.03466	-.04181	-.04888	-.05567	-.06196	-.06757	-.07232	-.07607	-.07871
20.	-.05278	-.05876	-.06528	-.07214	-.07911	-.08601	-.09260	-.09870	-.10412	-.10870	-.11229	-.11478
30.	-.09030	-.09612	-.10243	-.10903	-.11573	-.12232	-.12860	-.13438	-.13949	-.14377	-.14708	-.14934
40.	-.12697	-.13255	-.13856	-.14481	-.15110	-.15726	-.16310	-.16842	-.17309	-.17694	-.17997	-.18179
50.	-.16216	-.16742	-.17303	-.17880	-.18457	-.19016	-.19540	-.20013	-.20421	-.20751	-.20993	-.21140
60.	-.19509	-.19996	-.20506	-.21024	-.21534	-.22022	-.22471	-.22869	-.23203	-.23463	-.23641	-.23732
70.	-.22485	-.22923	-.23372	-.23817	-.24247	-.24647	-.25006	-.25312	-.25557	-.25732	-.25833	-.25857
80.	-.25035	-.25415	-.25791	-.26151	-.26485	-.26782	-.27034	-.27233	-.27372	-.27448	-.27459	-.27403
90.	-.27035	-.27348	-.27640	-.27902	-.28126	-.28306	-.28435	-.28511	-.28530	-.28492	-.28399	-.28253
100.	-.28352	-.28590	-.28788	-.28941	-.29043	-.29091	-.29085	-.29023	-.28909	-.28745	-.28537	-.28290
110.	-.28850	-.29008	-.29105	-.29140	-.29110	-.29018	-.28865	-.28656	-.28399	-.28099	-.27768	-.27414
120.	-.28411	-.28484	-.28477	-.28389	-.28223	-.27985	-.27680	-.27320	-.26914	-.26475	-.26016	-.25551
130.	-.26942	-.26932	-.26821	-.26612	-.26311	-.25928	-.25475	-.24964	-.24411	-.23834	-.23250	-.22676
140.	-.24404	-.24316	-.24108	-.23786	-.23359	-.22841	-.22247	-.21596	-.20907	-.20201	-.19500	-.18824
150.	-.20822	-.20666	-.20374	-.19954	-.19418	-.18783	-.18069	-.17296	-.16489	-.15672	-.14869	-.14106
160.	-.16301	-.16093	-.15736	-.15240	-.14620	-.13895	-.13087	-.12220	-.11322	-.10419	-.09538	-.08707
170.	-.11026	-.10785	-.10387	-.09843	-.09170	-.08389	-.07522	-.06597	-.05641	-.04684	-.03755	-.02881

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734
10.	-.08015	-.08035	-.07932	-.07706	-.07367	-.06923	-.06389	-.05780	-.05116	-.04415	-.03701	-.02993
20.	-.11610	-.11622	-.11512	-.11284	-.10945	-.10505	-.09978	-.09379	-.08727	-.08042	-.07344	-.06655
30.	-.15047	-.15043	-.14923	-.14690	-.14352	-.13918	-.13403	-.12821	-.12190	-.11530	-.10860	-.10201
40.	-.18263	-.18238	-.18103	-.17864	-.17527	-.17103	-.16604	-.16046	-.15445	-.14821	-.14191	-.13575
50.	-.21187	-.21134	-.20981	-.20733	-.20398	-.19986	-.19509	-.18983	-.18422	-.17845	-.17268	-.16709
60.	-.23733	-.23645	-.23468	-.23210	-.22878	-.22482	-.22034	-.21547	-.21037	-.20519	-.20008	-.19521
70.	-.25802	-.25671	-.25467	-.25197	-.24868	-.24491	-.24078	-.23640	-.23192	-.22746	-.22316	-.21916
80.	-.27283	-.27102	-.26865	-.26581	-.26258	-.25904	-.25532	-.25153	-.24777	-.24417	-.24083	-.23785
90.	-.28058	-.27820	-.27548	-.27248	-.26931	-.26605	-.26280	-.25968	-.25676	-.25414	-.25189	-.25010
100.	-.28013	-.27714	-.27401	-.27085	-.26774	-.26479	-.26209	-.25970	-.25772	-.25620	-.25518	-.25469
110.	-.27049	-.26683	-.26328	-.25994	-.25692	-.25430	-.25218	-.25060	-.24963	-.24929	-.24958	-.25051
120.	-.25095	-.24661	-.24262	-.23911	-.23618	-.23392	-.23240	-.23166	-.23174	-.23261	-.23427	-.23666
130.	-.22130	-.21629	-.21188	-.20819	-.20536	-.20345	-.20253	-.20263	-.20374	-.20583	-.20884	-.21267
140.	-.18195	-.17632	-.17151	-.16767	-.16492	-.16335	-.16299	-.16387	-.16595	-.16918	-.17344	-.17862
150.	-.13405	-.12788	-.12273	-.11876	-.11609	-.11481	-.11494	-.11649	-.11942	-.12362	-.12898	-.13533
160.	-.07951	-.07292	-.06751	-.06344	-.06083	-.05977	-.06029	-.06236	-.06594	-.07090	-.07710	-.08435
170.	-.02090	-.01405	-.00847	-.00434	-.00178	-.00086	-.00161	-.00402	-.00800	-.01344	-.02017	-.02798

ALPHA = 320.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.02056	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279
10.	-.01363	-.00802	-.00327	.00048	.00311	.00455	.00474	.00369	.00143	-.00198	-.00643	-.01179
20.	-.04729	-.04186	-.03728	-.03370	-.03122	-.02992	-.02984	-.03098	-.03331	-.03676	-.04121	-.04654
30.	-.07997	-.07483	-.07055	-.06724	-.06502	-.06395	-.06407	-.06536	-.06780	-.07130	-.07576	-.08104
40.	-.11116	-.10644	-.10257	-.09966	-.09781	-.09707	-.09745	-.09896	-.10155	-.10513	-.10960	-.11482
50.	-.14025	-.13608	-.13276	-.13037	-.12900	-.12868	-.12943	-.13122	-.13400	-.13768	-.14216	-.14729
60.	-.16651	-.16303	-.16039	-.15865	-.15788	-.15810	-.15930	-.16144	-.16446	-.16827	-.17274	-.17776
70.	-.18906	-.18642	-.18461	-.18366	-.18362	-.18448	-.18622	-.18878	-.19209	-.19604	-.20052	-.20539
80.	-.20692	-.20527	-.20443	-.20442	-.20523	-.20684	-.20921	-.21226	-.21590	-.22002	-.22449	-.22918
90.	-.21899	-.21848	-.21875	-.21980	-.22158	-.22406	-.22714	-.23075	-.23476	-.23906	-.24351	-.24799
100.	-.22417	-.22492	-.22642	-.22864	-.23151	-.23493	-.23880	-.24301	-.24743	-.25193	-.25636	-.26059
110.	-.22139	-.22349	-.22633	-.22980	-.23382	-.23826	-.24298	-.24784	-.25269	-.25738	-.26178	-.26574
120.	-.20982	-.21332	-.21752	-.22230	-.22751	-.23299	-.23857	-.24409	-.24938	-.25428	-.25864	-.26232
130.	-.18895	-.19383	-.19939	-.20545	-.21183	-.21834	-.22477	-.23095	-.23666	-.24176	-.24607	-.24946
140.	-.15881	-.16498	-.17180	-.17905	-.18652	-.19399	-.20122	-.20799	-.21411	-.21938	-.22364	-.22677
150.	-.12007	-.12735	-.13525	-.14354	-.15196	-.16025	-.16816	-.17545	-.18191	-.18733	-.19154	-.19443
160.	-.07408	-.08222	-.09097	-.10005	-.10919	-.11812	-.12656	-.13425	-.14097	-.14650	-.15068	-.15339
170.	-.02289	-.03157	-.04085	-.05043	-.06003	-.06935	-.07812	-.08606	-.09294	-.09855	-.10271	-.10530

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.01667	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312
10.	-.01789	-.02455	-.03157	-.03872	-.04581	-.05260	-.05890	-.06451	-.06926	-.07301	-.07565	-.07708
20.	-.05259	-.05916	-.06607	-.07309	-.08002	-.08665	-.09278	-.09821	-.10279	-.10637	-.10885	-.11015
30.	-.08699	-.09343	-.10015	-.10695	-.11363	-.11999	-.12582	-.13096	-.13525	-.13855	-.14077	-.14184
40.	-.12063	-.12686	-.13332	-.13981	-.14613	-.15209	-.15752	-.16224	-.16611	-.16902	-.17087	-.17161
50.	-.15292	-.15888	-.16499	-.17105	-.17690	-.18235	-.18723	-.19140	-.19473	-.19712	-.19849	-.19881
60.	-.18316	-.18877	-.19444	-.19998	-.20523	-.21002	-.21423	-.21770	-.22034	-.22208	-.22285	-.22263
70.	-.21050	-.21569	-.22082	-.22571	-.23023	-.23424	-.23761	-.24024	-.24206	-.24300	-.24285	-.24219
80.	-.23394	-.23863	-.24312	-.24725	-.25091	-.25398	-.25638	-.25802	-.25886	-.25888	-.25806	-.25645
90.	-.25235	-.25646	-.26021	-.26346	-.26613	-.26813	-.26941	-.26992	-.26965	-.26860	-.26681	-.26434
100.	-.26450	-.26796	-.27088	-.27315	-.27472	-.27553	-.27556	-.27481	-.27331	-.27109	-.26822	-.26480
110.	-.26916	-.27192	-.27393	-.27515	-.27553	-.27506	-.27375	-.27165	-.26882	-.26534	-.26133	-.25689
120.	-.26922	-.26724	-.26833	-.26845	-.26759	-.26580	-.26311	-.25961	-.25541	-.25063	-.24542	-.23994
130.	-.25184	-.25313	-.25330	-.25233	-.25026	-.24715	-.24309	-.23821	-.23266	-.22660	-.22021	-.21371
140.	-.22866	-.22927	-.22857	-.22658	-.22337	-.21903	-.21370	-.20753	-.20071	-.19346	-.18598	-.17852
150.	-.19591	-.19592	-.19447	-.19160	-.18740	-.18200	-.17556	-.16828	-.16037	-.15209	-.14367	-.13538
160.	-.15453	-.15409	-.15206	-.14851	-.14355	-.13732	-.13003	-.12189	-.11314	-.10406	-.09492	-.08599
170.	-.10624	-.10550	-.10310	-.09913	-.09369	-.08695	-.07913	-.07044	-.06117	-.05159	-.04199	-.03266

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.04335	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419
10.	-.07728	-.07623	-.07396	-.07055	-.06610	-.06074	-.05464	-.04798	-.04097	-.03381	-.02672	-.01993
20.	-.11023	-.10908	-.10676	-.10331	-.09886	-.09353	-.08748	-.08091	-.07400	-.06698	-.06004	-.05341
30.	-.14173	-.14043	-.13800	-.13450	-.13004	-.12475	-.11880	-.11237	-.10565	-.09884	-.09216	-.08581
40.	-.17122	-.16972	-.16713	-.16355	-.15908	-.15386	-.14805	-.14182	-.13536	-.12887	-.12255	-.11659
50.	-.19806	-.19627	-.19349	-.18980	-.18533	-.18020	-.17457	-.16861	-.16250	-.15643	-.15058	-.14514
60.	-.22144	-.21929	-.21627	-.21247	-.20799	-.20297	-.19758	-.19196	-.18629	-.18075	-.17550	-.17071
70.	-.24045	-.23789	-.23458	-.23063	-.22615	-.22128	-.21617	-.21098	-.20585	-.20096	-.19644	-.19243
80.	-.25408	-.25103	-.24739	-.24327	-.23880	-.23411	-.22935	-.22466	-.22018	-.21604	-.21238	-.20931
90.	-.26126	-.25765	-.25364	-.24934	-.24489	-.24041	-.23605	-.23193	-.22819	-.22494	-.22227	-.22027
100.	-.26093	-.25671	-.25229	-.24780	-.24337	-.23914	-.23523	-.23177	-.22885	-.22658	-.22501	-.22420
110.	-.25217	-.24731	-.24246	-.23777	-.23337	-.22940	-.22599	-.22323	-.22121	-.22000	-.21962	-.22009
120.	-.23435	-.22883	-.22354	-.21864	-.21429	-.21061	-.20771	-.20569	-.20460	-.20448	-.20533	-.20713
130.	-.20727	-.20110	-.19538	-.19029	-.18598	-.18258	-.18020	-.17891	-.17874	-.17971	-.18178	-.18489
140.	-.17129	-.16451	-.15840	-.15313	-.14887	-.14574	-.14385	-.14324	-.14394	-.14593	-.14914	-.15348
150.	-.12747	-.12017	-.11372	-.10830	-.10408	-.10119	-.09972	-.09971	-.10116	-.10403	-.10823	-.11363
160.	-.07755	-.06986	-.06314	-.05761	-.05343	-.05072	-.04958	-.05003	-.05206	-.05560	-.06057	-.06679
170.	-.02390	-.01595	-.00907	-.00347	.00069	.00328	.00422	.00348	.00109	-.00289	-.00833	-.01506

ALPHA = 330.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.02623	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667
10.	-.00376	.00099	.00475	.00738	.00881	.00901	.00795	.00567	.00225	-.00221	-.00758	-.01370
20.	-.03325	-.02865	-.02505	-.02257	-.02128	-.02122	-.02239	-.02475	-.02824	-.03274	-.03812	-.04423
30.	-.06184	-.05750	-.05417	-.05194	-.05088	-.05103	-.05238	-.05490	-.05849	-.06306	-.06846	-.07454
40.	-.08908	-.08511	-.08215	-.08028	-.07956	-.08001	-.08162	-.08434	-.08809	-.09275	-.09818	-.10422
50.	-.11444	-.11096	-.10848	-.10708	-.10680	-.10765	-.10960	-.11259	-.11654	-.12131	-.12678	-.13276
60.	-.13728	-.13441	-.13254	-.13173	-.13200	-.13334	-.13571	-.13904	-.14322	-.14814	-.15364	-.15955
70.	-.15683	-.15470	-.15357	-.15347	-.15440	-.15633	-.15921	-.16294	-.16742	-.17250	-.17803	-.18385
80.	-.17223	-.17098	-.17072	-.17145	-.17315	-.17578	-.17924	-.18344	-.18825	-.19352	-.19908	-.20479
90.	-.18253	-.18228	-.18301	-.18469	-.18728	-.19069	-.19482	-.19954	-.20472	-.21019	-.21579	-.22135
100.	-.18676	-.18762	-.18945	-.19218	-.19574	-.20002	-.20488	-.21018	-.21576	-.22145	-.22707	-.23246
110.	-.18400	-.18606	-.18906	-.19292	-.19752	-.20272	-.20837	-.21428	-.22028	-.22619	-.23183	-.23703
120.	-.17353	-.17682	-.18104	-.18606	-.19173	-.19788	-.20432	-.21085	-.21729	-.22342	-.22907	-.23406
130.	-.15491	-.15942	-.16483	-.17100	-.17772	-.18481	-.19203	-.19918	-.20603	-.21237	-.21802	-.22281
140.	-.12818	-.13382	-.14036	-.14759	-.15529	-.16324	-.17119	-.17890	-.18614	-.19268	-.19833	-.20291
150.	-.09394	-.10056	-.10806	-.11621	-.12476	-.13346	-.14203	-.15023	-.15779	-.16450	-.17014	-.17454
160.	-.05340	-.06078	-.06902	-.07787	-.08708	-.09635	-.10541	-.11397	-.12179	-.12862	-.13425	-.13852
170.	-.00835	-.01620	-.02491	-.03421	-.04382	-.05345	-.06281	-.07161	-.07959	-.08649	-.09212	-.09630

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.00998	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335
10.	-.02037	-.02740	-.03458	-.04168	-.04848	-.05479	-.06041	-.06516	-.06892	-.07155	-.07298	-.07318
20.	-.05086	-.05782	-.06490	-.07189	-.07856	-.08473	-.09019	-.09479	-.09839	-.10087	-.10216	-.10222
30.	-.08110	-.08795	-.09488	-.10168	-.10814	-.11407	-.11928	-.12362	-.12695	-.12918	-.13023	-.13008
40.	-.11068	-.11737	-.12408	-.13061	-.13676	-.14235	-.14720	-.15117	-.15413	-.15600	-.15672	-.15627
50.	-.13909	-.14556	-.15198	-.15816	-.16390	-.16904	-.17342	-.17690	-.17937	-.18078	-.18106	-.18021
60.	-.16570	-.17190	-.17795	-.18368	-.18891	-.19349	-.19727	-.20013	-.20200	-.20281	-.20255	-.20121
70.	-.18978	-.19564	-.20124	-.20643	-.21103	-.21492	-.21797	-.22009	-.22122	-.22132	-.22040	-.21846
80.	-.21045	-.21589	-.22096	-.22550	-.22936	-.23244	-.23464	-.23588	-.23615	-.23541	-.23371	-.23109
90.	-.22670	-.23167	-.23612	-.23990	-.24292	-.24507	-.24628	-.24653	-.24580	-.24412	-.24153	-.23812
100.	-.23745	-.24189	-.24564	-.24859	-.25066	-.25177	-.25190	-.25103	-.24921	-.24647	-.24291	-.23864
110.	-.24162	-.24548	-.24848	-.25053	-.25157	-.25157	-.25052	-.24847	-.24546	-.24160	-.23700	-.23180
120.	-.23824	-.24149	-.24371	-.24482	-.24479	-.24364	-.24138	-.23809	-.23387	-.22885	-.22318	-.21703
130.	-.22658	-.22922	-.23065	-.23083	-.22976	-.22746	-.22400	-.21950	-.21408	-.20791	-.20119	-.19410
140.	-.20629	-.20836	-.20906	-.20837	-.20631	-.20294	-.19837	-.19273	-.18619	-.17896	-.17126	-.16331
150.	-.17758	-.17915	-.17922	-.17777	-.17486	-.17057	-.16503	-.15841	-.15091	-.14276	-.13421	-.12551
160.	-.14129	-.14248	-.14206	-.14003	-.13646	-.13145	-.12517	-.11779	-.10955	-.10069	-.09149	-.08222
170.	-.09891	-.09986	-.09912	-.09673	-.09275	-.08730	-.08054	-.07269	-.06399	-.05469	-.04507	-.03544

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.04234	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056
10.	-.07212	-.06985	-.06642	-.06196	-.05659	-.05047	-.04380	-.03677	-.02959	-.02250	-.01569	-.00938
20.	-.10106	-.09869	-.09521	-.09070	-.08532	-.07922	-.07258	-.06562	-.05854	-.05156	-.04488	-.03872
30.	-.12873	-.12622	-.12263	-.11806	-.11265	-.10658	-.10001	-.09316	-.08624	-.07944	-.07298	-.06705
40.	-.15466	-.15194	-.14820	-.14354	-.13810	-.13206	-.12560	-.11892	-.11220	-.10567	-.09952	-.09393
50.	-.17826	-.17527	-.17132	-.16655	-.16108	-.15510	-.14877	-.14230	-.13588	-.12970	-.12396	-.11882
60.	-.19884	-.19551	-.19132	-.18640	-.18090	-.17499	-.16884	-.16265	-.15659	-.15086	-.14563	-.14105
70.	-.21559	-.21186	-.20738	-.20230	-.19676	-.19094	-.18502	-.17916	-.17356	-.16837	-.16377	-.15988
80.	-.22762	-.22342	-.21862	-.21335	-.20778	-.20208	-.19642	-.19097	-.18590	-.18137	-.17750	-.17442
90.	-.23399	-.22927	-.22409	-.21862	-.21302	-.20746	-.20212	-.19714	-.19269	-.18891	-.18589	-.18375
100.	-.23377	-.22847	-.22289	-.21721	-.21158	-.20619	-.20121	-.19677	-.19302	-.19006	-.18800	-.18689
110.	-.22616	-.22025	-.21425	-.20834	-.20270	-.19750	-.19290	-.18905	-.18605	-.18400	-.18296	-.18296
120.	-.21059	-.20406	-.19762	-.19149	-.18584	-.18085	-.17667	-.17342	-.17120	-.17009	-.17011	-.17127
130.	-.18688	-.17974	-.17288	-.16654	-.16089	-.15611	-.15234	-.14969	-.14826	-.14808	-.14916	-.15146
140.	-.15536	-.14765	-.14041	-.13387	-.12822	-.12364	-.12027	-.11819	-.11749	-.11818	-.12024	-.12361
150.	-.11694	-.10874	-.10118	-.09448	-.08884	-.08443	-.08139	-.07982	-.07975	-.08120	-.08411	-.08840
160.	-.07316	-.06459	-.05678	-.04995	-.04431	-.04005	-.03728	-.03608	-.03651	-.03854	-.04211	-.04711
170.	-.02609	-.01729	-.00931	-.00241	.00322	.00740	.01001	.01096	.01023	.00783	.00385	-.00160

ALPHA = 340.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03105	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998
10.	.00616	.00992	.01256	.01399	.01419	.01313	.01085	.00742	.00295	.00244	.00857	.01526
20.	-.01826	-.01463	-.01213	-.01083	-.01076	-.01193	-.01431	-.01783	-.02237	-.02779	-.03394	-.04063
30.	-.04189	-.03848	-.03620	-.03511	-.03526	-.03662	-.03917	-.04282	-.04747	-.05296	-.05915	-.06583
40.	-.06435	-.06125	-.05929	-.05851	-.05895	-.06058	-.06337	-.06721	-.07201	-.07761	-.08384	-.09051
50.	-.08520	-.08252	-.08096	-.08059	-.08141	-.08340	-.08649	-.09059	-.09558	-.10131	-.10760	-.11425
60.	-.10391	-.10174	-.10071	-.10084	-.10214	-.10456	-.10804	-.11245	-.11768	-.12356	-.12991	-.13655
70.	-.11986	-.11831	-.11791	-.11865	-.12052	-.12347	-.12740	-.13219	-.13769	-.14375	-.15018	-.15677
80.	-.13232	-.13151	-.13184	-.13330	-.13584	-.13940	-.14385	-.14907	-.15490	-.16116	-.16766	-.17420
90.	-.14053	-.14055	-.14172	-.14399	-.14730	-.15154	-.15659	-.16230	-.16848	-.17496	-.18153	-.18800
100.	-.14367	-.14462	-.14672	-.14989	-.15403	-.15903	-.16474	-.17097	-.17754	-.18425	-.19089	-.19727
110.	-.14100	-.14295	-.14604	-.15017	-.15521	-.16102	-.16741	-.17420	-.18117	-.18812	-.19483	-.20110
120.	-.13193	-.13491	-.13902	-.14413	-.15010	-.15673	-.16383	-.17118	-.17856	-.18575	-.19252	-.19867
130.	-.11612	-.12011	-.12523	-.13131	-.13818	-.14562	-.15342	-.16132	-.16909	-.17650	-.18332	-.18934
140.	-.09360	-.09854	-.10460	-.11158	-.11929	-.12749	-.13592	-.14433	-.15246	-.16008	-.16694	-.17284
150.	-.06489	-.07065	-.07752	-.08528	-.09371	-.10255	-.11153	-.12038	-.12882	-.13661	-.14350	-.14929
160.	-.03102	-.03741	-.04489	-.05326	-.06225	-.07158	-.08098	-.09016	-.09884	-.10676	-.11367	-.11937
170.	.00652	.00026	-.00814	-.01688	-.02621	-.03585	-.04552	-.05490	-.06373	-.07173	-.07866	-.08430

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	.00292	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234
10.	-.02230	-.02949	-.03660	-.04342	-.04974	-.05537	-.06014	-.06390	-.06654	-.06797	-.06817	-.06711
20.	-.04765	-.05479	-.06183	-.06856	-.07478	-.08029	-.08493	-.08855	-.09106	-.09236	-.09243	-.09125
30.	-.07281	-.07986	-.08679	-.09338	-.09942	-.10473	-.10916	-.11257	-.11485	-.11593	-.11579	-.11443
40.	-.09742	-.10437	-.11113	-.11750	-.12330	-.12834	-.13246	-.13556	-.13752	-.13830	-.13787	-.13623
50.	-.12108	-.12787	-.13441	-.14050	-.14597	-.15064	-.15438	-.15706	-.15861	-.15898	-.15816	-.15618
60.	-.14326	-.14984	-.15610	-.16185	-.16690	-.17111	-.17435	-.17652	-.17755	-.17742	-.17612	-.17370
70.	-.16334	-.16967	-.17559	-.18090	-.18545	-.18910	-.19174	-.19328	-.19369	-.19294	-.19107	-.18812
80.	-.18058	-.18662	-.19212	-.19692	-.20087	-.20386	-.20578	-.20660	-.20627	-.20481	-.20226	-.19871
90.	-.19417	-.19985	-.20487	-.20907	-.21234	-.21456	-.21568	-.21565	-.21449	-.21221	-.20891	-.20466
100.	-.20319	-.20846	-.21294	-.21648	-.21898	-.22035	-.22057	-.21961	-.21752	-.21435	-.21021	-.20520
110.	-.20674	-.21158	-.21546	-.21828	-.21995	-.22041	-.21966	-.21771	-.21462	-.21049	-.20545	-.19964
120.	-.20401	-.20838	-.21165	-.21372	-.21453	-.21404	-.21229	-.20931	-.20520	-.20008	-.19412	-.18749
130.	-.19439	-.19830	-.20095	-.20228	-.20223	-.20081	-.19806	-.19406	-.18895	-.18286	-.17599	-.16855
140.	-.17759	-.18106	-.18314	-.18377	-.18292	-.18062	-.17695	-.17201	-.16596	-.15897	-.15126	-.14307
150.	-.15379	-.15688	-.15846	-.15848	-.15694	-.15389	-.14942	-.14366	-.13679	-.12903	-.12060	-.11176
160.	-.12368	-.12648	-.12767	-.12722	-.12515	-.12151	-.11642	-.11004	-.10255	-.09418	-.08520	-.07586
170.	-.08849	-.09110	-.09205	-.09131	-.08890	-.08490	-.07943	-.07265	-.06478	-.05604	-.04670	-.03706

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.04010	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623
10.	-.06483	-.06140	-.05693	-.05154	-.04541	-.03873	-.03168	-.02449	-.01738	-.01056	-.00424	.00139
20.	-.08887	-.08536	-.08082	-.07539	-.06924	-.06256	-.05554	-.04840	-.04136	-.03463	-.02841	-.02290
30.	-.11188	-.10823	-.10358	-.09808	-.09190	-.08522	-.07824	-.07118	-.06426	-.05767	-.05163	-.04631
40.	-.13345	-.12960	-.12480	-.11920	-.11297	-.10630	-.09939	-.09245	-.08568	-.07931	-.07351	-.06848
50.	-.15309	-.14898	-.14399	-.13827	-.13198	-.12532	-.11850	-.11171	-.10517	-.09907	-.09361	-.08893
60.	-.17023	-.16581	-.16058	-.15470	-.14835	-.14172	-.13501	-.12842	-.12216	-.11642	-.11136	-.10715
70.	-.18420	-.17941	-.17390	-.16784	-.16142	-.15482	-.14826	-.14192	-.13601	-.13069	-.12614	-.12249
80.	-.19425	-.18903	-.18320	-.17695	-.17045	-.16391	-.15752	-.15149	-.14599	-.14119	-.13724	-.13425
90.	-.19961	-.19391	-.18772	-.18125	-.17467	-.16821	-.16204	-.15636	-.15134	-.14713	-.14387	-.14164
100.	-.19950	-.19327	-.18670	-.17999	-.17335	-.16697	-.16105	-.15578	-.15130	-.14776	-.14526	-.14389
110.	-.19325	-.18646	-.17949	-.17254	-.16583	-.15956	-.15392	-.14909	-.14520	-.14238	-.14071	-.14025
120.	-.18039	-.17303	-.16565	-.15847	-.15170	-.14555	-.14021	-.13584	-.13256	-.13049	-.12969	-.13017
130.	-.16076	-.15286	-.14508	-.13767	-.13085	-.12483	-.11979	-.11588	-.11322	-.11190	-.11195	-.11337
140.	-.13464	-.12622	-.11809	-.11047	-.10361	-.09772	-.09296	-.08949	-.08741	-.08678	-.08763	-.08993
150.	-.10278	-.09393	-.08549	-.07770	-.07081	-.06503	-.06052	-.05743	-.05585	-.05583	-.05737	-.06042
160.	-.06646	-.05728	-.04860	-.04069	-.03377	-.02807	-.02376	-.02097	-.01978	-.02022	-.02230	-.02593
170.	-.02740	-.01801	-.00918	-.00118	.00574	.01139	.01558	.01819	.01914	.01840	.01599	.01199



ALPHA = 350.

BETA/GAMMA	0.	10.	20.	30.	40.	50.	60.	70.	80.	90.	100.	110.
0.	.03486	.03754	.03903	.03927	.03825	.03601	.03261	.02816	.02279	.01667	.00998	.00292
10.	.01583	.01848	.01992	.02012	.01906	.01679	.01335	.00888	.00349	.00265	.00935	.01641
20.	-.00277	-.00023	.00110	.00119	.00003	-.00235	-.00587	-.01042	-.01588	-.02206	-.02879	-.03586
30.	-.02072	-.01835	-.01719	-.01728	-.01862	-.02116	-.02482	-.02950	-.03506	-.04132	-.04810	-.05518
40.	-.03771	-.03558	-.03468	-.03502	-.03660	-.03937	-.04324	-.04810	-.05380	-.06017	-.06701	-.07411
50.	-.05341	-.05161	-.05103	-.05170	-.05360	-.05666	-.06080	-.06589	-.07178	-.07828	-.08520	-.09232
60.	-.06743	-.06602	-.06586	-.06694	-.06923	-.07266	-.07713	-.08250	-.08861	-.09527	-.10228	-.10943
70.	-.07927	-.07836	-.07869	-.08026	-.08302	-.08689	-.09175	-.09745	-.10383	-.11068	-.11779	-.12496
80.	-.08842	-.08807	-.08898	-.09112	-.09443	-.09881	-.10412	-.11021	-.11688	-.12394	-.13117	-.13835
90.	-.09426	-.09456	-.09613	-.09892	-.10285	-.10780	-.11362	-.12013	-.12714	-.13443	-.14177	-.14895
100.	-.09621	-.09723	-.09952	-.10303	-.10765	-.11322	-.11959	-.12656	-.13393	-.14145	-.14891	-.15609
110.	-.09370	-.09549	-.09856	-.10283	-.10817	-.11441	-.12136	-.12882	-.13655	-.14432	-.15190	-.15905
120.	-.08629	-.08887	-.09275	-.09780	-.10388	-.11080	-.11834	-.12629	-.13439	-.14241	-.15009	-.15721
130.	-.07375	-.07711	-.08177	-.08760	-.09440	-.10198	-.11010	-.11852	-.12699	-.13523	-.14301	-.15009
140.	-.05611	-.06021	-.06560	-.07214	-.07961	-.08780	-.09646	-.10532	-.11411	-.12256	-.13043	-.13746
150.	-.03381	-.03853	-.04455	-.05170	-.05975	-.06847	-.07758	-.08681	-.09587	-.10451	-.11244	-.11943
160.	-.00762	-.01282	-.01933	-.02695	-.03545	-.04456	-.05402	-.06353	-.07281	-.08158	-.08956	-.09652
170.	.02128	.01577	.00896	.00105	-.00772	-.01708	-.02676	-.03645	-.04586	-.05471	-.06272	-.06966

BETA/GAMMA	120.	130.	140.	150.	160.	170.	180.	190.	200.	210.	220.	230.
0.	-.00429	-.01143	-.01828	-.02464	-.03032	-.03513	-.03894	-.04163	-.04312	-.04335	-.04234	-.04010
10.	-.02361	-.03074	-.03758	-.04391	-.04955	-.05433	-.05811	-.06075	-.06220	-.06239	-.06134	-.05906
20.	-.04303	-.05015	-.05694	-.06321	-.06878	-.07347	-.07714	-.07968	-.08102	-.08110	-.07994	-.07756
30.	-.06236	-.06941	-.07612	-.08229	-.08773	-.09228	-.09579	-.09815	-.09931	-.09922	-.09789	-.09535
40.	-.08126	-.08825	-.09485	-.10088	-.10614	-.11047	-.11375	-.11588	-.11678	-.11644	-.11486	-.11210
50.	-.09944	-.10634	-.11280	-.11863	-.12365	-.12771	-.13069	-.13250	-.13307	-.13240	-.13051	-.12744
60.	-.11650	-.12328	-.12955	-.13514	-.13986	-.14358	-.14618	-.14758	-.14774	-.14667	-.14438	-.14094
70.	-.13196	-.13859	-.14463	-.14991	-.15426	-.15756	-.15970	-.16062	-.16029	-.15872	-.15596	-.15209
80.	-.14526	-.15170	-.15746	-.16238	-.16629	-.16910	-.17070	-.17105	-.17014	-.16799	-.16468	-.16030
90.	-.15575	-.16197	-.16740	-.17190	-.17531	-.17754	-.17852	-.17823	-.17666	-.17386	-.16993	-.16498
100.	-.16275	-.16871	-.17377	-.17779	-.18064	-.18224	-.18253	-.18151	-.17922	-.17571	-.17110	-.16552
110.	-.16556	-.17123	-.17589	-.17939	-.18163	-.18254	-.18210	-.18031	-.17723	-.17296	-.16763	-.16139
120.	-.16355	-.16892	-.17314	-.17611	-.17771	-.17791	-.17671	-.17413	-.17025	-.16519	-.15912	-.15220
130.	-.15625	-.16131	-.16511	-.16753	-.16851	-.16801	-.16605	-.16269	-.15802	-.15220	-.14540	-.13782
140.	-.14345	-.14822	-.15161	-.15353	-.15392	-.15276	-.15010	-.14601	-.14061	-.13408	-.12660	-.11841
150.	-.12527	-.12978	-.13282	-.13431	-.13418	-.13246	-.12919	-.12447	-.11845	-.11130	-.10325	-.09453
160.	-.10224	-.10655	-.10932	-.11047	-.10996	-.10780	-.10406	-.09886	-.09235	-.08473	-.07624	-.06712
170.	-.07531	-.07949	-.08210	-.08303	-.08228	-.07985	-.07582	-.07032	-.06351	-.05560	-.04683	-.03747

BETA/GAMMA	240.	250.	260.	270.	280.	290.	300.	310.	320.	330.	340.	350.
0.	-.03670	-.03225	-.02688	-.02076	-.01406	-.00701	.00020	.00734	.01419	.02056	.02623	.03105
10.	-.05563	-.05115	-.04576	-.03962	-.03292	-.02586	-.01866	-.01153	-.00470	.00164	.00728	.01206
20.	-.07404	-.06949	-.06404	-.05785	-.05112	-.04405	-.03686	-.02976	-.02298	-.01670	-.01114	-.00645
30.	-.09168	-.08700	-.08144	-.07518	-.06840	-.06132	-.05414	-.04709	-.04038	-.03421	-.02877	-.02423
40.	-.10822	-.10336	-.09766	-.09130	-.08446	-.07735	-.07020	-.06321	-.05661	-.05058	-.04532	-.04099
50.	-.12330	-.11821	-.11233	-.10583	-.09891	-.09178	-.08466	-.07777	-.07131	-.06548	-.06045	-.05639
60.	-.13647	-.13110	-.12499	-.11833	-.11132	-.10417	-.09710	-.09032	-.08405	-.07847	-.07374	-.07003
70.	-.14723	-.14152	-.13515	-.12830	-.12118	-.11402	-.10701	-.10039	-.09435	-.08907	-.08471	-.08142
80.	-.15499	-.14891	-.14223	-.13517	-.12795	-.12077	-.11385	-.10742	-.10165	-.09674	-.09282	-.09002
90.	-.15916	-.15265	-.14565	-.13836	-.13102	-.12383	-.11703	-.11082	-.10538	-.10089	-.09748	-.09524
100.	-.15915	-.15218	-.14482	-.13729	-.12983	-.12265	-.11599	-.11003	-.10497	-.10095	-.09810	-.09650
110.	-.15443	-.14698	-.13925	-.13147	-.12390	-.11674	-.11024	-.10457	-.09991	-.09641	-.09417	-.09326
120.	-.14465	-.13671	-.12861	-.12059	-.11290	-.10579	-.09945	-.09408	-.08986	-.08689	-.08529	-.08508
130.	-.12969	-.12127	-.11281	-.10456	-.09678	-.08970	-.08354	-.07849	-.07469	-.07226	-.07129	-.07178
140.	-.10976	-.10090	-.09211	-.08365	-.07579	-.06875	-.06276	-.05800	-.05460	-.05268	-.05229	-.05345
150.	-.08542	-.07619	-.06712	-.05849	-.05056	-.04357	-.03773	-.03322	-.03018	-.02869	-.02881	-.03054
160.	-.05766	-.04815	-.03887	-.03010	-.02212	-.01516	-.00944	-.00513	-.00236	-.00121	-.00173	-.00388
170.	-.02779	-.01810	-.00869	.00016	.00817	.01511	.02076	.02495	.02755	.02849	.02773	.02530

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] Alberts, B., Bray, D., Lewis, J., Roff, M., Robert, K., & Watson, J. D.  
Molecular Biology of the Cell. New York : Garland, 1983.
- [2] Clayton, R. K. Photosynthesis: physical mechanisms and chemical pattern. Cambridge : Cambridge University Press, 1980.
- [3] Lehninger, A. L. Biochimie. Paris : Flammarion medicine-Sciences, 1970.
- [4] Leblanc, R.M. Notes de cours. 1988.
- [5] Baker, N. R., & Markwell, J. P. Pigment-Protein Complexes and their Interactions. In J. Barber & N. R. Baker (Eds.), Photosynthetic Mechanisms and the Environment. New York : Elsevier, 1985, pp. 51-90.
- [6] Katz, J. J., & Norris, J. R. Jr. Chlorophyll and Light Energy Transduction in Photosynthesis. Curr. Top. Bioenerg, 1973, 5, 41-75.
- [7] Leblanc, R.M., & Chapados, C. Aggregation of Chlorophyll in Monolayers. Biophys. Chem., 1976, 6, 77-85.
- [8] Strouse, C. E. Structural Studies Related to Photosynthesis: A Model for Chlorophyll Aggregates in Photosynthetic Organisms.

Prog. Inorg. Chem., 1976, 21, 159-177.

- [9] Antipka, A. F., Leblanc, R. M., Fragata, M., Tancredi, P., Dodelet, J.-P.,  
& Pazdernick, L. R. Relative Orientation of Chlorophyll-a  
Molecules Dimer 1. Dipôle-dipôle Approximation  
(résultats inédits)
- [10] Drolet, J.-P. Etude théorique de l'interaction électrostatique dans  
le dimère de chlorophylle/par J.-P. Drolet. Trois-Rivières:  
Université du Québec à Trois-Rivières, 1988.
- [11] Morin, M. Etudes des isothermes de pression de surface du  
système Chlorophylle/Quinone à l'interface air-eau/ par M. Morin.  
Trois-Rivières : Université du Québec à Trois-Rivières, 1978.
- [12] Gouterman, M. Study of the Effects of Substitution on the Absorption  
Spectra of Porphin. J. Chem. Phys., 1959, 30, 1139-1161.
- [13] Katz, J. J., Shipman, L. L., Cotton, T. M., & Janson, T. R.  
Chlorophyll Aggregation : Coordination Interactions in  
Chlorophyll Monomers, Dimers, and Oligomers. In D. Dolphin (Ed.),  
The Porphyrins. New York : Academic Press, 1977, pp. 401-458.
- [14] Cotton, T. M., Trifunac, A. D., Ballschmiter, K., & Katz, J. J. State of  
Chlorophyll a in vivo and in vitro from Electronic Transition

- Spectra, and the Nature of Antenna Chlorophyll. Biochim. Biophys. Acta, 1974, 368, 181-198.
- [15] Katz, J. J., Norris, J. R., & Shipman, L. L. Models for Reaction-Center and Antenna Chlorophyll. Brookhaven Symp. Biol., 1976, 28, 16-45.
- [16] Shipman, L. L., Janson, T. R., & Katz, J. J. Donor Properties of the Three Carbonyl Groups of Chlorophyll a : ab initio calculations and  $^{13}\text{C}$  magnetic resonance studies. Proc. Natl. Acad. Sci. USA, 1975, 72, 2873-2876.
- [17] Wilkin, A. Etude de la fonction d'onde du fragment moléculaire central de la chlorophylle/par A. Wilkin. Trois-Rivières: Université du Québec à Trois-Rivières, 1984.
- [18] Kratky, C., & Dunitz, J. D. Ordered Aggregation States of Chlorophyll a and some Derivatives. J. Mol. Biol., 1977, 113, 431-442.
- [19] Weiss, C. The  $\pi$  Electron Structure and Absorption Spectra of Chlorophyll in Solution. J. Mol. Spectrosc., 1972, 44, 37-80.
- [20] Merzbacher, E. Quantum Mechanics. New York : John Wiley and Sons, 1961.
- [21] White, R. L. Basic Quantum Mechanics. New York : McGraw-Hill, 1966.

- [22] Slater, J. C. Quantum Theory of Matter. New York : McGraw-Hill, 1968.
- [23] Pople, J. A., & Beveridge, D. L. Approximate Molecular Orbital Theory. New York : McGraw-Hill, 1970.
- [24] Shipman, L. L., Norris, J. R., & Katz, J. J. Quantum Mechanical Formalism for Computation of the Electronic Spectral Properties of Chlorophyll Aggregates. J. Phys. Chem., 1976, 80, 877-882.
- [25] Kasha, M., Rawls, H. R., & El-Bayoumi, A. The Exciton Model in Molecular Spectroscopy. Pure Appl. Chem., 1965, 11, 371-392.
- [26] Förster, Th. Delocalized Excitation and Excitation Transfer. In O. Sinanoglu (Ed.), Modern Quantum Chemistry. New York : Academic Press, 1965, pp. 93-137.
- [27] Kauzmann, W. Quantum Chemistry. New York : Academic Press, 1957.
- [28] Weiss, C., Kobayashi, H., & Gouterman, M. Spectra of Porphyrins Part III. Self-Consistent Molecular Orbital Calculation of Porphyrins and Related Ring Systems. J. Mol. Spectrosc., 1965, 16, 415-450.

- [29] McHugh, A., Gouterman, M., & Weiss, C. Porphyrins XXIV. Energy, Oscillator Strength, and Zeeman Splitting Calculations (SCMO-CI) for Phthalocyanine, Porphyrins and Related Ring Systems. Theor. Chim. Acta, 1972, 24, 346-370.
- [30] Shipman, L. L., Cotton, T. M., Norris, J. R., & Katz, J. J. An Analysis of the Visible Absorption Spectrum of Chlorophyll a Monomer, Dimer, and Oligomers in Solution. J. Am. Chem. Soc., 1976, 98, 8222-8229.
- [31] Greenwood, H. H. Computing Methods in Quantum Chemistry. New York : Wiley-Interscience, 1972.
- [32] Ruedenberg, K., & Scherr, C. W. Free-electron Net Work of Conjugated Molecules. J. Chem. Phys., 1953, 21, 1965-1981.
- [33] Le Brech, J., Antipppa, A. F., & Leblanc, R. M. The Absorption Spectrum of Chlorophyll a and the Chlorophyll/Dioxane and Chlorophyll/Benzoquinone Interactions. Chem. Phys. Lett., 1974, 26, 37-44.
- [34] Le Brech, J. Spectre d'Absorption de la Chlorophylle a et Interactions Chlorophylle/Dioxane et Chlorophylle/Benzoquinone calculés par la Méthode Electron-Libre/ par J. Le Brech. Trois-Rivières : Université du Québec à Trois-Rivières, 1976.
- [35] Clapp, R. E. Loop Currents in Chlorophyll a. Theor. Chim. Acta

(Berlin), 1982, 61, 105-133.

- [36] Christoffersen, R. E., & Maggiora, G. M. Ab Initio Calculations on Large Molecules using Molecular Fragments. Preliminary Investigations. Chem. Phys. Lett., 1969, 3, 419-423.
- [37] Christoffersen, R. E., Genson, D. W., & Maggiora, G. M. Ab Initio Calculations on Large Molecules using Molecular Fragments. Evaluation and Extension of Initial Procedures. J. Chem. Phys., 1971, 54, 239-252.
- [38] Christoffersen, R. E., Spangler, D., Hall, G. G., & Maggiora, G. M. Ab Initio Calculations on Large Molecules using Molecular Fragments. Hydrocarbon Characterizations. J. Chem. Soc., 1973, 95, 8526-8536.
- [39] Frost, A. A. Floating Spherical Gaussian Orbital Model of Molecular Structure. II. One- and Two-Electron-Pair Systems. J. Chem. Phys., 1967, 47, 3714-3716.
- [40] Maggiora, G. M., & Christoffersen, R. E. Ab Initio Calculations on Large Molecules using Molecular Fragments. Generalization and Characteristics of Floating Spherical Gaussian Basic Sets. J. Am. Chem. Soc., 1976, 98, 8325-8332.

- [41] Song, P.-S., Moore, T. A., & Sun, M. Excited States of Plant Pigments.  
In C. O. Chichester (Ed.), The Chemistry of Plant  
Pigments. New York : Academic Press, 1972, pp. 33-74.
- [42] Spangler, D., McKenny, R., Christoffersen, R. E., Maggiora, G. M.,  
& Shipman, L. L. Ab Initio Calculations on Large Molecules using  
Molecular Fragments. Preliminary Investigation of Ethyl  
Chlorophyllide a and Related Molecules. Chem. Phys. Lett.,  
1975, 36, 427-431.
- [43] Spangler, D., Maggiora, G. M., Shipman, L. L., & Christoffersen, R. E.  
Stereoelectronic Properties of Photosynthetic and Related  
Systems. 2. Ab Initio Quantum Mechanical Ground State  
Characterization of Magnesium Porphine, Chlorin, and Ethyl  
Pheophorbide a. J. Am. Chem. Soc., 1977, 99, 7470-7477.
- [44] Petke, J. D., Maggiora, G. M., Shipman, L. L., & Christoffersen, R. E.  
Stereoelectronic Properties of Photosynthetic and Related  
Systems. Ab Initio Configuration Interaction Calculations  
of the Ground and Lower Excited Singlet and Triplet States of  
Magnesium Porphine and Porphine. J. Mol. Spectrosc., 1978, 71,  
64-84.



- [45] Petke, J. D., Maggiora, G. M., Shipman, L. L., & Christoffersen, R. E.  
Stereoelectronic Properties of Photosynthetic and Related  
Systems. Ab Initio Configuration Interaction Calculations  
of the Ground and Lower Excited Singlet and Triplet States of  
Magnesium Chlorin and Chlorin. J. Mol. Spectrosc., 1978, 73, 64-  
84.
- [46] Petke, J. D., Maggiora, G. M., Shipman, L. L., & Christoffersen, R. E.  
Stereoelectronic Properties of Photosynthetic and Related  
Systems. Ab Initio Configuration Interaction Calculations  
of the Ground and Lower Excited Singlet and Triplet States of  
Ethyl Chlorophyllide a and Ethyl Pheophorbide a. Photochem.  
Photobiol., 1979, 30, 203-223.